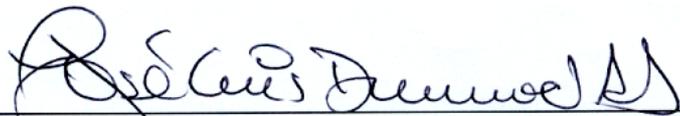


UMA IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL PARA ANÁLISE TRANSIENTE  
TRIDIMENSIONAL DE MEIOS DESCONTÍNUOS PELO MÉTODO DOS  
ELEMENTOS DISCRETOS

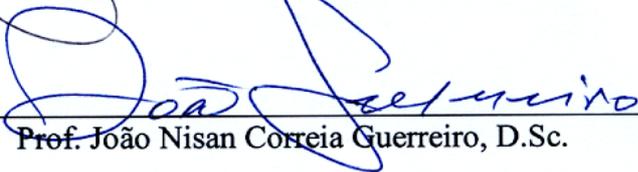
Rosenil Brandão Mendes

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS  
PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE  
FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS  
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM  
ENGENHARIA CIVIL.

Aprovada por:



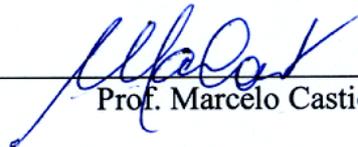
\*Prof. José Luis Drummond Alves, D.Sc.



Prof. João Nisan Correia Guerreiro, D.Sc.



Prof. Alvaro L. G. A. Coutinho, D.Sc.



Prof. Marcelo Castier, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

JUNHO DE 2004

# **Livros Grátis**

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

MENDES, ROSENIL BRANDÃO

Uma Implementação Computacional  
para Análise Transiente Tridimensional de  
Meios Descontínuos pelo Método Dos  
Elementos Discretos [Rio de Janeiro] 2004

XII, 104 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ,  
M.Sc., Engenharia Civil, 2004)

Tese - Universidade Federal do Rio de  
Janeiro, COPPE

1. Método dos Elementos Discretos
2. Mecânica Granular
3. Fluxo de Partículas

I. COPPE/UFRJ II. Título ( série )

# Agradecimentos

Ao meu orientador, Professor José Luis Drummond Alves, pela dedicação e amizade com que me orientou no desenvolvimento desta tese, sobretudo, por ter me envolvido no seu entusiasmo pela pesquisa, que tem gerado muitos frutos contribuindo de forma significativa para excelência desta instituição.

À Lucia Coelho e ao Denis pela amizade e companheirismo que tornou nosso ambiente de trabalho, a extensão de minha própria casa, pelos valores e conhecimentos transmitidos, pelas sugestões que foram de grande importância para desenvolvimento dessa tese.

Ao Prof. Luiz Landau, também pela oportunidade e apoio, e por disponibilizar o suporte físico e materiais necessários à realização deste trabalho.

Ao Professor. Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho juntamente com toda equipe do Núcleo de Atendimento em Computação de Alto Desempenho (NACAD), pelo apoio técnico, conhecimentos transmitidos com valiosas sugestões durante o desenvolvimento dessa tese .

Ao corpo técnico e administrativo do Laboratório de Métodos Computacionais em Engenharia (LAMCE), pelo suporte técnico e humano.

Ao Centro Nacional de Supercomputação CESUP/RS, pela disponibilização dos recursos computacionais do Cray T94.

À secretaria acadêmica do Programa de Engenharia Civil da COPPE, pela atenção dispensada aos procedimentos necessários ao desenvolvimento deste trabalho.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pela bolsa de estudos concedida no primeiro ano de realização desse trabalho.

À Agência Nacional do Petróleo (ANP), que através do Programa de Recursos Humanos da ANP para Formação de Profissionais de Engenharia Civil para o Setor de Petróleo e Gás (PRH02), disponibilizou bolsa de estudo e apoio financeiro indispensáveis à condução dessa pesquisa.

A todos os colegas de mestrado e doutorado da COPPE, que compartilharam sua amizade e conhecimentos durante o desenvolvimento desta pesquisa.

À minha família pelo apoio e carinho dispensados, e de modo especial aos meus pais, que sempre estiveram torcendo e orando por mim, o que me trouxe a segurança de que as dificuldades sempre podem ser superadas e certeza de que todo sacrifício vale a pena.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

UMA IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL PARA ANÁLISE TRANSIENTE  
TRIDIMENSIONAL DE MEIOS DESCONTÍNUOS PELO MÉTODO DOS  
ELEMENTOS DISCRETOS

Rosenil Brandão Mendes

Junho de 2004

Orientador: José Luis Drummond Alves

Programa: Engenharia Civil

A simulação mecânica de meios descontínuos tem sido um grande desafio para a engenharia. Os modelos de análise baseados na mecânica do contínuo perdem eficiência e precisão quando o efeito das discontinuidades em pequena escala adquirem relevância. Os avanços tecnológicos dos meios computacionais vêm viabilizando, cada vez mais, a utilização dos métodos baseados na mecânica granular. Portanto, há um crescimento recente na aplicação do Método dos Elementos Discretos, no estudo do comportamento mecânico de meios granulares, tais como, rocha, solo e leitos de materiais granulares.

Esse trabalho apresenta uma implementação de um algoritmo para análise transiente tridimensional do comportamento mecânico de meios descontínuos pelo Método dos Elementos Discretos, utilizando elementos esféricos com variada distribuição de tamanhos e propriedades físicas. Além disso, o algoritmo é capaz de gerar modelos de elementos discretos com grande número de elementos, a partir de um conjunto de polígonos, que delimitam o domínio do problema, e das distribuições de tamanho e propriedades físicas dos elementos que o constituem.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

A COMPUTATIONAL IMPLEMENTATION FOR THREE-DIMENSIONAL  
TRANSIENT ANALYSIS OF DISCONTINUOUS MEDIA BY THE DISCRETE  
ELEMENT METHOD

Rosenil Brandão Mendes

June, 2004

Advisor: José Luis Drummond Alves

Department: Civil Engineering

Mechanical simulation of discontinuous media has been a great challenge for engineering. The analysis models based on continuum mechanics lose efficiency and accuracy when the micro-mechanic discontinuity effects become relevant. Recent computational technology advances make feasible the use of the methods based on granular mechanics. Therefore, there is a recent growth in the application of the Discrete Element Method in the study of the mechanical behavior of granular media, such as, rock, ground and beds of granular materials.

This work presents an implementation of a three-dimensional transient algorithm for mechanical analysis of discontinuous media by the Discrete Element Method, using spherical elements with different sizes and physical properties. The present implementation is capable to generate models of discrete elements with great number of elements, from a set of polygons, which delimit the domain of the problem, and the distributions of size and physical properties of the elements within.

# Índice

Agradecimentos .....	iii
Índice .....	vii
Lista de Figuras .....	x
Lista de Tabelas .....	xii
<b>Capítulo 1 .....</b>	<b>1</b>
Introdução.....	1
1.1 Simulação Numérica de Meios Descontínuos.....	1
1.2 Problemas de Natureza Discreta.....	2
1.2.1 Aplicações Relacionadas com os Meios Descontínuos.....	2
1.2.2 Aplicações na Indústria do Petróleo.....	8
1.2.3 Simulação da Produção de Areia.....	11
1.3 Motivação.....	13
1.4 Objetivos.....	13
1.5 Organização do Texto.....	14
<b>Capítulo 2 .....</b>	<b>15</b>
Método dos Elementos Discretos .....	15
2.1 Descrição Geral do Método.....	15
2.2 Revisão Histórica do Método .....	16
2.3 Formulação Numérica .....	19
2.3.1 Caracterização Cinemática do Elemento.....	19
2.3.2 Definição de Parede.....	20
2.3.3 Princípio da Impenetrabilidade.....	21

2.3.4	Mecanismo do Contato .....	22
2.3.5	Cinemática do Contato .....	25
2.3.6	Equações Constitutivas.....	31
2.3.7	Modelo de Força de Contato .....	32
2.3.8	Equações do Movimento .....	38
2.4	Efeito do Amortecimento .....	40
2.5	Esquema de Integração no Tempo.....	43
<b>Capítulo 3</b>	<b>.....</b>	<b>46</b>
	Implementação Computacional .....	46
3.1	Classificação das Aplicações Paralelas .....	46
3.2	Etapas da Modelagem.....	50
3.3	Pré-processamento - Geração de Modelo.....	51
3.4	Processamento - Ciclo Computacional.....	54
3.5	Pesquisa dos Pares de Contato .....	54
3.5.1	Construção da Estrutura de Dados por Células .....	57
<b>Capítulo 4</b>	<b>.....</b>	<b>62</b>
	Exemplos Numéricos.....	62
4.1	Considerações Iniciais .....	62
4.2	Simulação de Impacto .....	64
4.3	Simulação de Fluxo Granular .....	69
4.4	Simulação do Processo de Produção de Areia em Poços de Petróleo.....	75
4.5	Simulação da Segregação Granular.....	84
4.6	Oscilações Harmônicas em Meio Granular.....	89
<b>Capítulo 5</b>	<b>.....</b>	<b>93</b>
	Conclusões e Recomendações .....	93
5.1	Contribuições deste Trabalho .....	93
5.2	Considerações Gerais .....	94

5.3	Sugestões para Trabalhos Futuros .....	95
	<b>Referências Bibliográficas .....</b>	<b>97</b>

## Lista de Figuras

Figura 1.1 - Simulação de impacto aplicando MEF/MED [51].	4
Figura 1.2 - Simulação de corte em rocha aplicando MEF/MED [51].	5
Figura 1.3 - Simulação de impacto em alta velocidade, de [48].	7
Figura 1.4 - Simulação da interação solo-estrutura em dutos subterrâneos [51].	9
Figura 1.5 - Formas de ruptura em amostra de arenito de [28].	12
Figura 1.6 - Cortes longitudinais e transversais - Produção de areia segundo [59].	12
Figura 2.1 - Representação geométrica através de super-quádricas.	17
Figura 2.2 - Caracterização cinemática do elemento esférico.	20
Figura 2.3 - Modelo de elemento discreto e interação com paredes.	21
Figura 2.4 - Penetração permitida no contato entre elementos.	24
Figura 2.5 - Penetração permitida no contato entre parede e elementos.	25
Figura 2.6 - Sistema de referência local para o contato entre os elementos.	26
Figura 2.7 - Caracterização cinemática do contato.	28
Figura 2.8 - Lei de atrito de Coulomb: (a) clássica e (b) regularizada.	29
Figura 2.9 - Sistema de referência local para o contato elemento-parede.	31
Figura 2.10 - Modelo esquemático da força de contato.	33
Figura 2.11 - Curvas típicas dos modelos de força de contato.	34
Figura 2.12 - Curvas da relação força versus penetração com variação de $\varepsilon$ .	36
Figura 2.13 - Superfície de ruptura adotada.	37
Figura 2.14 - Efeito do amortecimento com coeficiente de restituição igual a 0.5.	41
Figura 2.15 - Efeito do amortecimento com coeficiente de restituição igual a $10^{-7}$ .	42
Figura 3.1 - Geração do modelo de elemento discreto.	52
Figura 3.2 - Geração pseudo aleatória do conjunto primário de elementos.	53
Figura 3.3 - Cópias do conjunto primário de elementos e obtenção do modelo final.	53
Figura 3.4 - Ciclo de cálculo.	54
Figura 3.5 - Algoritmo Força Bruta.	55
Figura 3.6 - Domínio 3D dividido em células.	55
Figura 3.7 - Representação de células numa região retangular.	57

Figura 3.8 - Exemplo com duas células bidimensionais e sete elementos. ....	58
Figura 3.9 - Construção das listas encadeadas para duas células 2D. ....	58
Figura 3.10 - Rotina para obtenção dos arranjos HEAD e LIST. ....	59
Figura 3.11 - Esquema de busca entre células vizinhas. ....	60
Figura 4.1 - Modelo esquemático da simulação do impacto entre os blocos $B_1$ e $B_2$ . ...	64
Figura 4.2 - Campo de velocidade e forma deformada vista em perspectiva. ....	67
Figura 4.3 - Campo de velocidade e forma deformada vista em corte. ....	68
Figura 4.4 - Geometria do cilindro. ....	69
Figura 4.5 - Simulação de fluxo granular em cilindro com rampa helicoidal. ....	71
Figura 4.6 - Resultados da simulação de fluxo granular em cilindro helicoidal. ....	72
Figura 4.7 - Distribuição de carga computacional Cray SV1. ....	74
Figura 4.8 - Distribuição de carga computacional Cray T94. ....	74
Figura 4.9 - Modelo de elemento discreto para simulação da produção de areia. ....	76
Figura 4.10 - Campo de deslocamento na fase de perfuração do poço. ....	78
Figura 4.11 - Campo de velocidade na fase de perfuração do poço. ....	79
Figura 4.12 - Campo de deslocamento na fase de produção do poço. ....	80
Figura 4.13 - Campo de velocidade na fase de produção do poço. ....	81
Figura 4.14 - Deslocamento granular em simulação da segregação. ....	86
Figura 4.15 - Deslocamento granular no contorno do modelo. ....	87
Figura 4.16 - Ensaio experimental de particulado sob oscilações harmônicas [6]. ....	89
Figura 4.17 - Simulação de particulado sob oscilações harmônicas [6]. ....	89
Figura 4.18 - Simulação de particulado submetido a oscilações harmônicas. ....	92

## Lista de Tabelas

Tabela 1 - Parâmetros de simulação.....	40
Tabela 2 - Classificação das aplicações com padrão de comunicação estático.....	47
Tabela 3 - Classificação das aplicações com padrão de comunicação dinâmico.....	48
Tabela 4 - Classificação de acordo com a dificuldade da implementação paralela. ....	49
Tabela 5 - Parâmetros micro-mecânicos - Simulação de Impacto. ....	65
Tabela 6 - Dados do modelo da Simulação de Impacto. ....	65
Tabela 7 - Tempo de processamento. ....	66
Tabela 8 - Parâmetros micro-mecânicos para a Simulação de Fluxo Granular. ....	70
Tabela 9 - Dados do modelo da Simulação de Fluxo Granular.....	70
Tabela 10 - Tempo total de processamento.....	73
Tabela 11 - Resumo dos dados de desempenho do código. ....	73
Tabela 12 - Parâmetros micro-mecânicos para simulação de areia.....	77
Tabela 13 - Tempo de processamento.....	83
Tabela 14 - Parâmetros micro-mecânicos para simulação da segregação granular.....	85
Tabela 15 - Dados geométricos da simulação de segregação granular. ....	85
Tabela 16 - Tempo de processamento.....	88
Tabela 17 - Parâmetros micro-mecânicos. ....	90
Tabela 18 - Tempo de processamento.....	91

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Simulação Numérica de Meios Descontínuos

Tem-se alcançado muito progresso na análise mecânica dos meios granulares considerando-os como meios contínuos. Essa consideração implica na aproximação dos efeitos de complexos mecanismos micro-estruturais existentes no material, por correlações físicas macroscópicas, desconsiderando, por exemplo, a ocorrência de vazios em outra escala. Porém, essa perspectiva de análise é apropriada somente quando os efeitos das descontinuidades em escalas inferiores são desprezíveis. Neste caso, do ponto vista macroscópico, o material apresenta um comportamento de meio contínuo.

Para problemas que apresentam comportamento descontínuo em grande escala tal como nas aplicações de mecânica da fratura; análise de resistência de solos, rochas e materiais compósitos; fluxo de materiais granulares, entre outros, os modelos contínuos não são capazes de representar os fenômenos que ocorrem em pequena escala. Esses últimos determinam quando ocorre a ruptura dos materiais e de que forma acontece a transição entre os estados de equilíbrio em micro-escala.

Há um grande esforço da comunidade científica em todo mundo, na busca de novas tecnologias que resultem no desenvolvimento de métodos e modelos capazes de representar adequadamente os fenômenos físicos que ocorrem nos meios descontínuos. Sobretudo, aqueles que ainda não foram simulados de forma suficientemente realista e eficiente.

Existem problemas de natureza discreta em diversas áreas da atividade industrial, que apresentam desafios para a engenharia na viabilização de simulações computacionais. As dificuldades encontradas vão desde a concepção de um modelo numérico que represente bem o problema físico, à limitação na capacidade dos recursos computacionais disponíveis. Nesse contexto, as técnicas de simulação computacionais baseadas em partículas ou dinâmica granular têm sido fonte de pesquisa em modelagens alternativas para problemas que não são bem representados pelos métodos contínuos tradicionais.

## **1.2 Problemas de Natureza Discreta**

Dentro do contexto de aplicação da pesquisa em materiais que apresentam comportamento de natureza discreta, podemos destacar aqueles que têm sido abordados com frequência na literatura. Basicamente, estes se resumem na investigação dos eventos mecânicos que envolvem fluxo granular, danos localizados, grande deformações e problema de contato com alta taxa de deformação e fragmentação. Todos estes estudos são de grande interesse para o desenvolvimento tecnológico de vários setores. A seguir, são citadas algumas aplicações relacionadas com o comportamento dos meios descontínuos.

### **1.2.1 Aplicações Relacionadas com os Meios Descontínuos**

Na fadiga dos materiais, observa-se que o efeito decorrente de carregamentos cíclicos ocasiona o surgimento de micro-fissuras, podendo levar o material à ruptura, ainda que as deformações permaneçam dentro dos limites de comportamento elástico na escala macroscópica. MALVERN [44] menciona as dificuldades no tratamento desse problema sob a ótica do contínuo, em função das características de descontinuidade que ele apresenta. Além do exemplo anterior, Malvern cita os problemas de supersônica em atmosfera extremamente rarefeita, onde a Mecânica do Contínuo não é uma abordagem razoável, em razão da escala de descontinuidade.

Nas simulações de fluxo de materiais granulares, podem ocorrer efeitos de ações coletivas entre as partículas originando fenômenos como formação de pilha e avalanches. ABREU [2] verificou a ocorrência de formação de arcos em simulações de

fluxo granular em descarregamento de silos. Com efeito, esse fenômeno provoca o entupimento desses equipamentos podendo gerar grandes prejuízos com a perda dos mesmos ou com a paralisação da produção. Observou-se ainda em [2] a segregação de misturas em meios granulares simulando o fenômeno conhecido como ‘efeito castanha-do-pará’. Efeitos como esses tornam evidente alguns comportamentos peculiares dos sistemas de natureza discreta.

O estudo do comportamento dos materiais granulares têm sido de grande importância para diversos segmentos da indústria, encontrando aplicações na agroindústria com estudos de armazenamento e transporte de grãos, na indústria de alimentos, na indústria de fármacos, na indústria química, e em outros segmentos que tenham como parte de sua cadeia produtiva a manipulação de materiais granulares.

Nos estudos do colapso em materiais como solos e rochas apresentados em [22] e [40], pode-se notar que os problemas inerentes à hipótese dos meios contínuos exigem algumas considerações especiais em relação à malha na previsão das zonas de plastificação e da propagação da fratura, o que torna mais difícil a modelagem podendo inviabilizar a aplicação da Formulação Clássica do Método dos Elementos Finitos.

Existem muitas aplicações, onde uma parte do domínio de análise é constituída por algum material que se comporta como meio contínuo, como por exemplo os metais, outra parte por material com comportamento granular, como solos ou rochas friáveis. Nestes problemas, o tratamento da interação entre materiais com comportamentos tão distintos tem sido um grande desafio, visto que, a aplicação de métodos contínuos ou discretos, de forma isolada, não atende este problema, adequadamente.

Neste contexto, algumas pesquisas vêm trabalhando no sentido de associar métodos contínuos e discretos. Um exemplo é a aplicação apresentada na Figura 1.1, que simula o impacto de um artefato de aço contra um bloco de rocha, através da combinação do Método dos Elementos Finitos (MEF) com o Método dos Elementos Discretos (MED), neste trabalho [51], são abordados ainda vários outros problemas geomecânicos que podem ser tratados desta forma, como na Figura 1.2, numa simulação de corte de rochas, onde são mostrados os modos de fratura em vários instantes de análise.

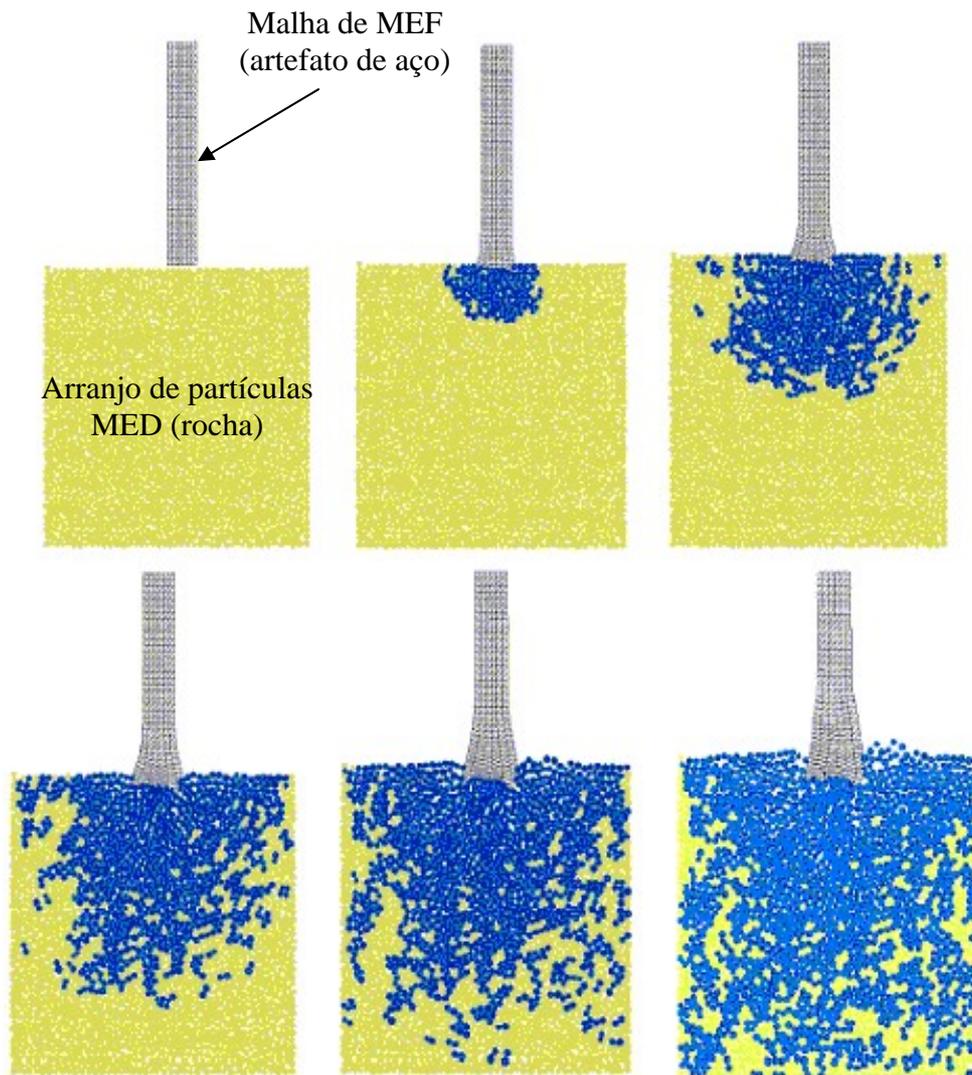


Figura 1.1 - Simulação de impacto aplicando MEF/MED [51].

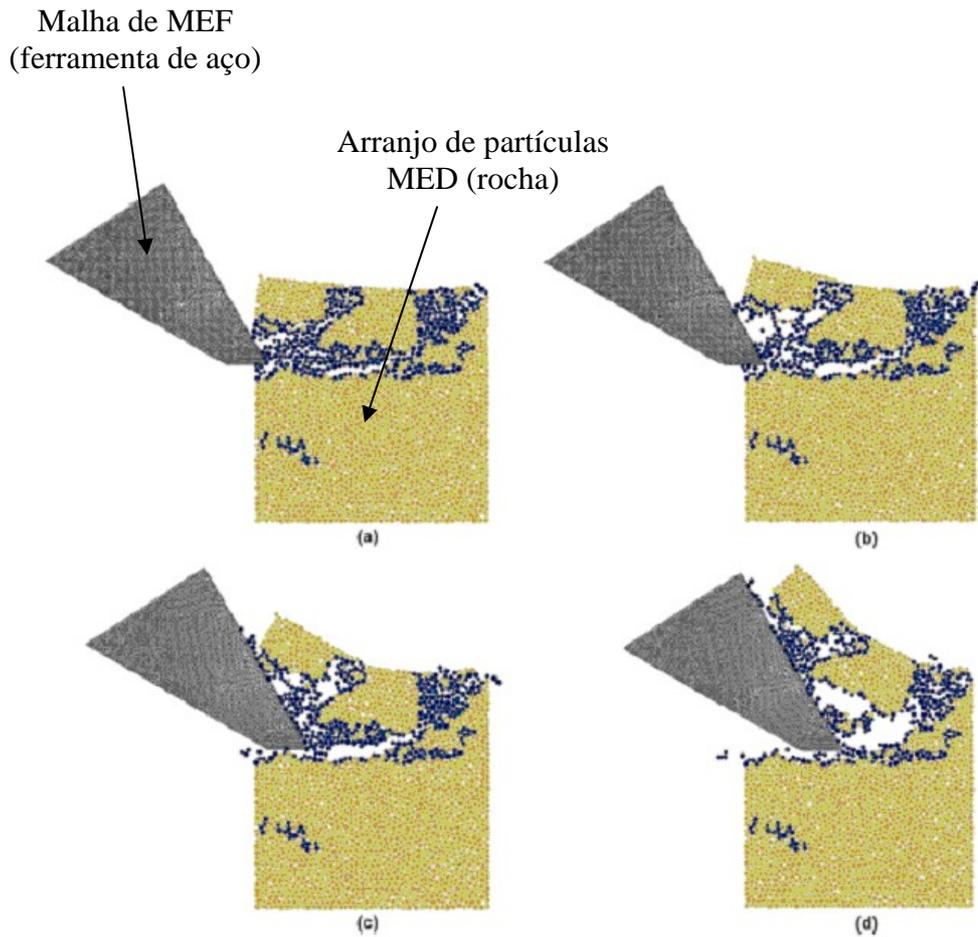


Figura 1.2 - Simulação de corte em rocha aplicando MEF/MED [51].

Outro exemplo de aplicação de métodos mistos surge na indústria aeroespacial, em virtude da alta velocidade envolvida em problemas de impacto. Esse tipo de aplicação vem se tornando cada vez mais relevante, na medida em que tem sido fundamental para os projetos que sustentam os avanços na conquista do espaço.

Como consequência das numerosas missões espaciais realizadas nas últimas décadas, milhares de objetos foram colocados em órbita, e a crescente demanda tecnológica do mercado comercial de telecomunicações impulsionou ainda mais o ritmo de lançamentos. Devido às explosões de parte dos equipamentos utilizados no foguete, de colisões, e de várias outras causas, resultaram da atividade desses lançamentos uma grande quantidade de lixo espacial composta por fragmentos orbitais que aumentam o risco para as novas missões espaciais.

Garantir a segurança de futuras missões tornou-se um grande problema para a indústria aeroespacial. Existem estimativas [48] de que o número de objetos não catalogados com dimensões da ordem de centímetros aproxima-se de milhões, aumentando a probabilidade de choque. As velocidades típicas da colisão contra um desses objetos encontram-se na escala de 5 km/s a 15 km/s [48] e são capazes de danificar ou de incapacitar uma nave espacial. Atualmente é imprescindível fazer previsões sobre os efeitos do impacto de partículas em alta velocidade nos projetos de naves e outros equipamentos espaciais.

Nos trabalhos iniciais em projetos de proteção contra impacto de partículas em alta velocidade, utilizava-se uma tecnologia experimental caríssima que realizava estudo de impacto com velocidade de até sete quilômetros por segundo. Mesmo com os recentes desenvolvimentos de novas tecnologias experimentais, a escala do trabalho é de aproximadamente 11 km/s. Além disso, para uma aproximação experimental do problema, seria necessário um número muito grande de testes de impacto para que fosse contemplada toda combinação possível de geometrias, de materiais, de velocidades e de diferentes ângulos de impacto.

Diante do problema exposto, há muito interesse no desenvolvimento de ferramentas computacionais para a simulação do impacto em altas velocidades. As pesquisas envolvidas na simulação do impacto à velocidade elevada, onde [9],[10] são exemplos de estudos de impacto com fragmentos orbitais, tradicionalmente basearam-se nas Formulações Eulerianas e Lagrangiana do contínuo. Entretanto as experiências descritas em [19] e [20] mostraram que os modelos de análise convencionais não atendiam às necessidades das aplicações atuais.

Foram propostos novos métodos numéricos, em que uma linha de pesquisa baseou-se na formulação Lagrangiana-Euleriana Arbitrária (ALE) [5], outra foi desenvolvida a partir do método baseado na Hidrodinâmica de Partículas Regularizadas ( Smoothed Particles Hydrodynamics – SPH ) [57]. Além disso, para problemas que apresentam dificuldades na aplicação das técnicas tradicionais Lagrangianas ou Eulerianas, foram propostas formulações mistas de contínuo e partículas. Entre elas, está a que faz o acoplamento de hidrodinâmica de partículas com a formulação de elementos finitos, [34] , [35], [36],

através de um algoritmo baseado no contato-impacto por penalização, conectando as partículas do SPH ao modelo lagrangiano de elementos finitos.

Uma formulação híbrida partícula-elemento foi desenvolvida recentemente por FAHRENTHOLD e HORBAN [21], onde combinaram-se as potencialidades gerais da formulação acoplada dos métodos SPH e MEF, minimizando os problemas inerentes ao uso do método contínuo puro ou de métodos puros de partícula. A Figura 1.3 ilustra uma aplicação desta formulação ao estudo do impacto em alta velocidade de um projétil contra uma placa [48].

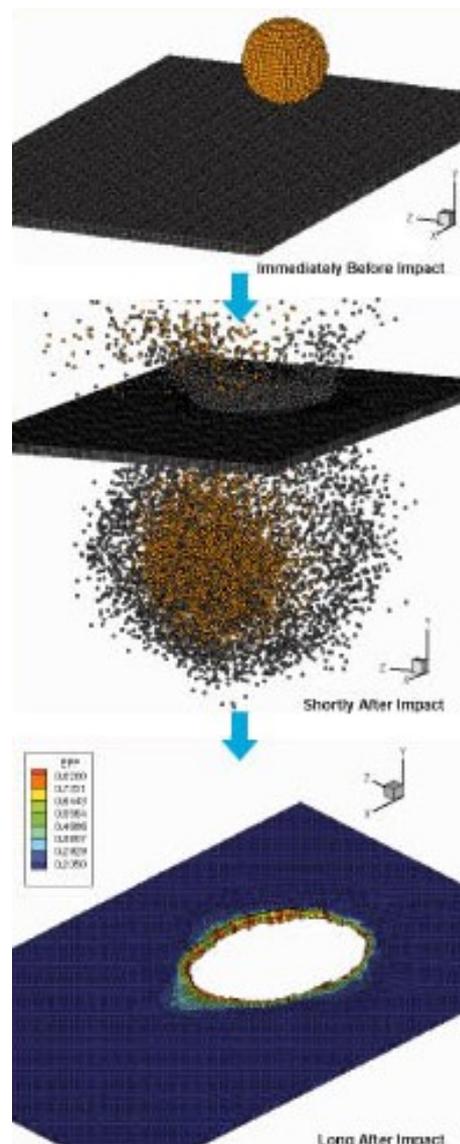


Figura 1.3 - Simulação de impacto em alta velocidade, de [48].

Nesta formulação, utilizam-se simultaneamente elementos finitos e partículas para modelagem de efeitos físicos distintos no meio onde ocorre o impacto, possibilitando simulações de impacto com velocidades da ordem de quinze mil metros por segundo.

### **1.2.2 Aplicações na Indústria do Petróleo**

Os problemas relacionados com os meios descontínuos estão presentes em grande parte da cadeia produtiva da indústria do petróleo. Os estudos nessa área podem ser aplicados desde a prospecção e avaliação de campos petrolíferos como subsídio nas investigações geológicas, abrangendo áreas da produção ao refino do petróleo, em diversos processos que envolvem o comportamento de materiais granulares.

O transporte do petróleo e seus derivados é sem dúvida uma parte importante na cadeia de produção desta indústria, sobretudo num país com dimensões continentais como o Brasil. Assim, grande parte da produção de óleo, gás e seus subprodutos são transportados através de oleodutos ou gasodutos, que interligam plataformas, refinarias e centros de distribuição. Os oleodutos e gasodutos, passando por terra ou em ambiente marinho, estão sujeitos a sérios riscos de acidente, podendo gerar prejuízos financeiros e ambientais de grandes proporções. Por estas razões, muitas pesquisas têm sido realizadas no sentido de desenvolver a tecnologia de dutos, para minimizar custos e garantir mais segurança na aplicação desta alternativa de transporte, que é indispensável para o Brasil.

As linhas de dutos subterrâneas ou em assoalho marinho estão sempre interagindo com o solo, seja absorvendo esforços transmitidos por este ou transferindo carga, como por exemplo de correntes marinhas para o solo oceânico. Uma perspectiva de análise desta interação solo-estrutura recai novamente na aplicação da combinação de métodos contínuos com métodos discretos. Neste sentido, podemos citar a simulação do problema de ovalização da seção de dutos subterrâneos, submetidos ao carregamento aplicado na superfície do terreno [51]. A Figura 1.4 apresenta a deformação da seção do duto para diversos níveis de carregamento. Nesta simulação o duto foi modelado com elementos finitos e o solo foi modelado com elementos discretos.

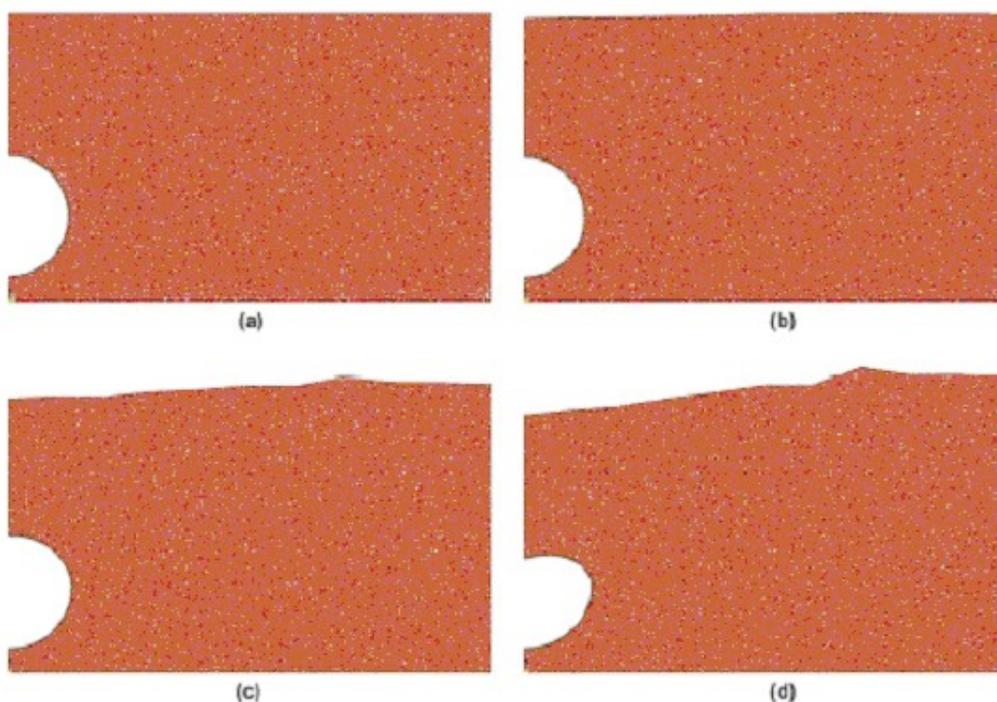


Figura 1.4 - Simulação da interação solo-estrutura em dutos subterrâneos [51].

A expansão das fronteiras de exploração de petróleo para águas profundas e ultraprofundas gerou uma forte demanda por novas tecnologias que fossem capazes de garantir a exploração comercial dessas novas áreas. A perfuração de poços direcionais foi uma das novas tecnologias empregadas, para melhorar o fator de recuperação dos reservatórios e reduzir o número de plataformas. Entretanto, a utilização desta nova tecnologia terminou por agravar os problemas de instabilidade de poços, que têm como consequência um incremento nos custos de perfuração, podendo levar à perda do poço em alguns casos.

A instabilidade dos poços está associada à baixa resistência de algumas formações rochosas, como os arenitos friáveis, não-consolidados ou com pouca consolidação. Assim, na fase de perfuração do poço, a utilização de lamas especiais introduz uma pressão na parede do poço de forma que sua integridade seja mantida. Entretanto, na fase de produção ocorre um aumento nas tensões efetivas na formação rochosa que compõe o reservatório em consequência da extração do fluido. Esta mudança no estado

de tensões precisa ser controlada para evitar a ruptura da formação. Este controle pode ser realizado através da aplicação de um diferencial de pressão adequado, mas existem ainda vários outros fatores [8] que podem influenciar na estabilidade de poços.

O desenvolvimento de métodos numéricos para análise da instabilidade em poços de petróleo tem sido fundamental para compreensão desse problema. Ainda sob a ótica de um meio contínuo, entre as pesquisas iniciais nesta área, encontra-se o trabalho de POLILLO [53], que utilizou o modelo elastoplástico de Mohr-Coulomb na representação do comportamento mecânico da formação, acoplado um modelo de fluxo potencial para o escoamento na análise de estabilidade de poços através do Método dos Elementos Finitos.

Com a evolução dos modelos numéricos de análise, foram contemplados outros fenômenos relacionados com a estabilidade dos poços verticais e horizontais que afetam a produção de petróleo, como por exemplo o colapso de poro. Este fenômeno ocorre em função do aumento das tensões na matriz rochosa e é caracterizado pela redução irreversível na porosidade. O colapso de poro tem como consequência a diminuição do fluxo no interior do reservatório devido à redução da permeabilidade, provocando uma queda drástica na produção do poço. Além disso, na vizinhança do poço, onde ocorre a maior queda na pressão de poro, o colapso de poro pode induzir à produção de areia, que é outro problema grave que pode encarecer demasiadamente a produção.

Um modelo numérico baseado no Método dos Elementos Finitos capaz de representar o fenômeno de colapso de poro através de uma relação constitutiva foi apresentado por COELHO [12]. Os modelos de ruptura de Drucker-Prager e Mohr-Coulomb foram utilizados neste trabalho. Para limitar o estado de tensões hidrostático admissível, os modelos de ruptura utilizados foram fechados por uma superfície elíptica (“*cap model*”). Dando seqüência ao trabalho desenvolvido por COELHO [12], TISSER [62] substituiu o *cap* elíptico por um *cap* suave, contínuo à superfície de ruptura de Mohr-Coulomb. O objetivo da utilização desse novo *cap* foi eliminar a singularidade existente no contato do *cap* elíptico com a superfície do modelo de ruptura.

O desenvolvimento desses modelos numéricos tem sido muito importante para o estudo de estabilidade de poços, pois possibilitam a previsão da região de colapso de poros, qualificando prováveis alterações na permeabilidade do reservatório. Além disso, a implementação desses modelos tem sido uma ferramenta de análise que permite avaliar a probabilidade de ocorrência da produção de areia. Entretanto a natureza discreta do fenômeno de produção de areia é um fator limitante para aplicação dos modelos numéricos baseados na mecânica do contínuo como, por exemplo, o Método dos Elementos Finitos. Sendo assim, este fenômeno tem sido objeto de pesquisa, onde se buscam alternativas de simulação e análise do problema, que permitam o desenvolvimento de ferramentas numéricas para avaliação de procedimentos, de forma a minimizar os riscos associados a este processo.

### **1.2.3 Simulação da Produção de Areia**

A produção de areia é um processo desencadeado na fase de produção do poço de petróleo, em consequência dos fragmentos da rocha reservatório que são transportados pelos fluidos. A separação da areia do óleo bem como o tratamento necessário para disposição final desse material envolve processos de alto custo. Além disso, esse fenômeno pode estar associado a vários problemas que surgem durante a produção do poço, entre os quais podemos citar:

- Queda na produção devido à alteração da permeabilidade no reservatório.
- Instabilidade do poço em função do acréscimo de tensões.
- Abrasão do revestimento do poço, dutos e demais equipamentos que processam o óleo.
- Entupimento do poço e linhas de conexão, se quantidade suficiente de areia for produzida.

Por estas e outras razões, a indústria do petróleo tem grande interesse na pesquisa e desenvolvimento de técnicas que permitam uma melhor compreensão desse fenômeno. Várias estratégias têm sido utilizadas pelos pesquisadores, na tentativa de se fazer previsões da ocorrência do fenômeno de produção de areia, assim como no desenvolvimento de novas tecnologias que permitam minimizar seus efeitos. No trabalho de ABASS *et al* [1] são estudadas algumas características das formações que

apontam alternativas de análise. As pesquisas experimentais tentam reproduzir o fenômeno em laboratório para estudá-lo, e resultados importantes têm sido apresentados, como mostra a Figura 1.5 do trabalho de HAIMSON e LEE [28].

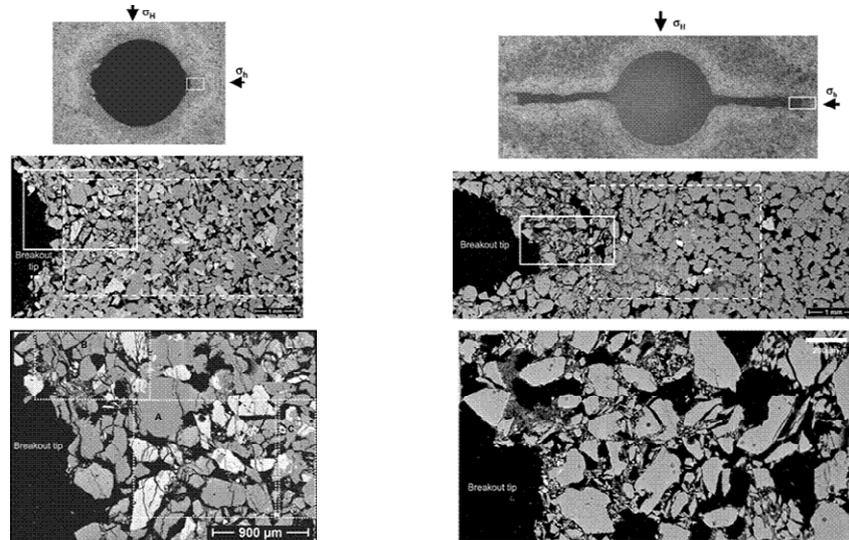


Figura 1.5 - Formas de ruptura em amostra de arenito de [28].

Outra estratégia tem sido o desenvolvimento de ferramentas numéricas para simulação do processo de produção de areia. Entre as pesquisas desenvolvidas nessa linha, podemos destacar as que estão sendo realizadas nos Estados Unidos pelo *Sandia National Laboratories* (SNL) [59]. Este laboratório apresenta alguns resultados através de sua página na Internet, como mostra a Figura 1.6. Esta e outras pesquisas têm utilizado o MED como técnica numérica para simulação desse fenômeno.

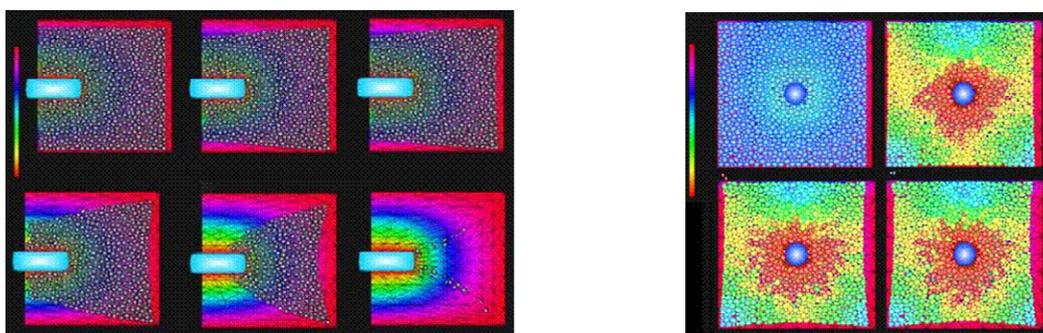


Figura 1.6 - Cortes longitudinais e transversais - Produção de areia segundo [59].

### **1.3 Motivação**

O método dos elementos discretos tem sido aplicado em muitos problemas relacionados com o comportamento dos meios descontínuos, tais como aqueles citados nas seções anteriores. Observa-se sua utilização desde áreas de pesquisa como biomecânica [47], química [39] até as áreas tradicionais no uso intensivo de simulações numéricas, como os vários ramos da engenharia onde se encontram grande parte das aplicações [22], [40], [58].

O potencial de aplicações desse método vem estimulando a implementação de ferramentas computacionais que podem contribuir para o desenvolvimento tecnológico de vários setores industriais, e sobretudo do setor de óleo e gás natural, através de aplicações como aquelas apresentadas anteriormente. Por essa motivação, foi implementado neste trabalho um algoritmo para análise transiente tridimensional em meio descontínuo, pelo método dos elementos discretos.

### **1.4 Objetivos**

O objetivo deste trabalho, é a implementação de um programa baseado no Método dos Elementos Discretos, para simulações tridimensionais de meios descontínuos. Para atender à necessidade das aplicações de maior demanda computacional, um objetivo associado foi a busca de alternativas para implementações em plataformas computacionais de alto desempenho, viabilizando análises de grande porte. Com este objetivo o programa foi implementado utilizando diretivas OpenMP [7], para as plataformas do Cray SV1 NACAD\COPPE\UFRJ e CRAY T94 do CESUP/RS.

Acessoriamente, implementou-se um programa para geração de modelos de elementos discretos através da técnica de cópias sucessivas. Esta técnica permite, de maneira eficiente, gerar modelos de elementos discretos com grande número de partículas e com distribuições homogêneas de tamanhos e propriedades físicas para as partículas.

Como os modelos adotados nas aplicações do MED, em sua maioria, não consideram forças coesivas, outro objetivo focado nesta implementação é encontrar um modelo de

força de contato, que incorporasse boa parte dos efeitos micro-mecânicos já estudados, incluindo forças coesivas. Além disso, para possibilitar a experiência de simulação do processo de produção de areia, um objetivo é a introdução no modelo dos efeitos da interação das partículas com fluido.

## **1.5 Organização do Texto**

O texto está organizado em cinco capítulos. No capítulo 2, são apresentadas as descrições gerais, um histórico do Método dos Elementos Discretos, e uma revisão da literatura, iniciando-se pelas origens do desenvolvimento do MED. Em seguida é abordada a formulação adotada na implementação.

No capítulo 3, são abordados alguns aspectos da implementação computacional, como o pré-processamento com o programa de geração de modelos. Neste capítulo, apresenta-se também a estrutura de dados adotada, e as técnicas de otimização de desempenho computacional utilizadas, principalmente com respeito ao algoritmo utilizado na busca de contato entre as partículas. Este tem por objetivo potencializar o desempenho através de bom nível de vetorização e paralelização do código.

No capítulo 4, são apresentados os exemplos de aplicação do método. O primeiro representando a classe de problemas que envolvem os mecanismos de deformação e fratura em eventos de contato e impacto. Em outro exemplo é ilustrada a aplicabilidade do método em análise de fluxo granular. Neste exemplo são apresentados os dados referentes à análise de desempenho do código, executado no Cray SV1 e no Cray T94. Ainda neste contexto dos meios granulares, realiza-se um exemplo onde se verifica o fenômeno de segregação granular, e em outro se trata da simulação de meio granular submetido a vibrações harmônicas.

Neste capítulo, apresenta-se também um exemplo de aplicação para análise do processo de produção de areia. Neste exemplo tenta-se afinar com a perspectiva apresentada em SNL [59] para simulação do processo de produção de areia, que tem sido grande problema para a Indústria do Petróleo. O capítulo 5 finaliza o trabalho com as conclusões e recomendações para futuras pesquisas.

# Capítulo 2

## Método dos Elementos Discretos

Neste capítulo, serão apresentados inicialmente uma descrição geral e um breve histórico do Método dos Elementos Discretos (MED), enfatizando os aspectos relevantes na evolução do método. Em seguida, é feita uma descrição da formulação adotada na implementação, contextualizando as hipóteses assumidas pelo método nas aplicações em problemas de fluxo granular e simulações em sistemas de partículas.

### 2.1 Descrição Geral do Método

O Método dos Elementos Discretos é uma técnica lagrangiana de modelagem numérica utilizada na solução de problemas que podem ser representados como um conjunto de corpos ou partículas discretas. Esses elementos discretos podem ser rígidos ou deformáveis, interagindo através de forças de contato.

O elemento é descrito utilizando-se funções matemáticas tais como esferas, elipsóides poliedros, etc. A imposição de condições de contorno num sistema de partículas pode ser realizada de várias formas. Uma forma natural e bastante utilizada é a que impõe a condição de contorno através da análise de interação com obstáculos, que freqüentemente são descritos como paredes. Portanto, para simular a interação com obstáculos, existe uma definição de parede rígida, que neste caso, representa uma região plana do espaço que tem interferência com o domínio dos elementos discretos. Essas paredes são caracterizadas fisicamente, e interagem por contato com as partículas.

As forças de contato são determinadas através de uma lei que relaciona força e deslocamento relativo entre os elementos em contato. De forma semelhante são calculadas também as forças de contato entre elementos e paredes. Além das forças de

contato, forças de campo como, gravidade, força eletromagnética e pressão de fluido também podem atuar sobre os elementos.

A aplicação da equação de Newton de conservação da quantidade de movimento para cada elemento descreve a relação entre a força resultante que atua sobre o elemento e a taxa de variação da quantidade de movimento. A conservação do momento angular para cada elemento descreve a relação entre o torque resultante que atua sobre o elemento e a taxa de variação de momento angular. Sendo assim, o movimento do conjunto de todos os elementos interagindo entre si e com possíveis obstáculos pode ser determinado através da solução do sistema de equações diferenciais de segunda ordem. Este sistema é formado pelas equações de conservação da quantidade de movimento para cada elemento. Finalmente, esta solução permite conhecer a posição e velocidade de cada elemento ao longo do tempo, em relação a um referencial fixo no espaço.

O método explícito de integração numérica é o mais utilizado no Método dos Elementos Discretos, e em geral o intervalo de estabilidade conduz a um passo de tempo muito pequeno, podendo ser da ordem de nano-segundos, dependendo do material. Conseqüentemente, o volume de cálculo para uma análise pode ser de grande proporção. Contudo, apesar do MED exigir processamento intensivo, implementações que utilizam as capacidades computacionais das arquiteturas de processadores vetoriais e paralelos viabilizam aplicações em modelos com grande número de elementos.

## **2.2 Revisão Histórica do Método**

Desde a apresentação inicial do *Distinct Element Method* em 1971 por CUNDALL [14], houve um interesse crescente por esse método, que posteriormente passou a ser conhecido por *Discrete Element Method (DEM)*, e muitos avanços foram sendo alcançados. Originalmente, este método tinha como objetivo o estudo de deslocamentos em sistema de blocos de rocha, através de uma representação bidimensional com elementos em forma de discos, e a paredes rígidas representadas por segmentos de reta. Suas aplicações se estenderam ao estudo de fluxo granular [64], à pesquisa dos micro-mecanismos em materiais granulares [17] e desenvolvimento de fratura em rocha e concreto [41],[52].

Um programa desenvolvido em 1980 [16],[37] combinou a formulação do MED com a formulação de elementos finitos para análise das deformações no interior de cada elemento discreto. Dessa forma, incluiu-se a possibilidade de análise em sistemas de corpos deformáveis. Nesse caso, as análises em modelos com grande número de elementos tornam-se proibitivas. Entretanto, esta perspectiva encontra muita aplicação no estudo de sistemas de blocos de grandes dimensões e com um número menor de elementos.

Em 1988, CUNDALL [18] e HART *et al* [29], publicou uma formulação tridimensional do MED, utilizando elementos com forma poliédrica, propondo uma estrutura de dados e um algoritmo de busca de contatos apropriados a esta forma. WILLIAMS e PENTLAND [65] utilizaram as super-quádricas como forma geométrica para os elementos. A descrição bidimensional da super-quádrica é dada pela equação (2.1), onde a variação dos parâmetros  $a$ ,  $n$  e  $s$  permite a representação de elementos discretos com diversas formas geométricas, como mostra a Figura 2.1.

$$x^n + \left(\frac{y}{a}\right)^n = s^n \quad (2.1)$$

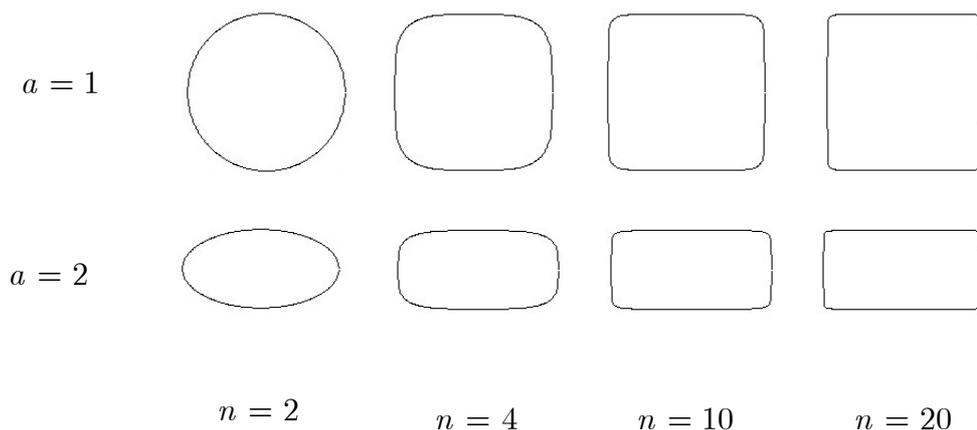


Figura 2.1 - Representação geométrica através de super-quádricas.

O desenvolvimento de modelos de elemento discretos com outras formas geométricas permitiu analisar os efeitos da variação de forma no comportamento das simulações. Nesta perspectiva, CLEARY e SAWLEY [11] avaliaram o efeito da forma dos elementos sobre o fluxo granular no descarregamento de silo. Neste trabalho, as partículas foram modeladas com formas circulares ou super-quádras bidimensionais. A possibilidade de se empregar formas geométricas mais fiéis aos grãos representou um avanço importante no desenvolvimento do método. Entretanto, o aumento no esforço computacional introduzido pelos elementos com formas mais complexas limitou sua utilização, de modo que elementos circulares e esféricos ainda são os mais utilizados.

A interação sólido-fluido foi estudada através do acoplamento do MED com as formulações da dinâmica dos fluidos [30],[33],[63], modeladas através de métodos baseados na mecânica do contínuo, como o Método do Elementos Finitos (FEM) ou Método das Diferenças Finitas (MDF). Dentre as várias formas de acoplamento, está a que considera a solução das equações da mecânica para o elemento discreto, com a força de interação fluido-sólido calculada aplicando-se a teoria de escoamento em meios porosos, com utilização das propriedades macroscópicas deste meio. KLOSEK [43] utilizou uma forma de acoplamento do MED com as formulações de escoamentos em meios porosos na qual a permeabilidade é calculada a partir da distribuição granulométrica representativa do meio poroso. Neste caso, uma mudança na configuração do meio granular pode ocasionar alterações significativas no tensor de permeabilidade, adicionando uma relação não linear no cálculo da força de interação fluido-sólido.

Em 2000, um volume especial da revista Powder Technology [50] apresentou vários artigos relacionados ao MED. Recentemente, um foco das pesquisas tem sido o desenvolvimento de códigos mais eficientes em plataformas computacionais de alto desempenho [11], com objetivo de viabilizar análises com grande número de elementos. Uma nova linha de pesquisa deu início ao estudo da combinação do MED com o MEF para análise dinâmica de problemas geomecânicos. O estado da arte nesta nova linha de pesquisa é apresentado no trabalho de OÑATE e ROJEK [51]. Neste trabalho o modelo de contato utilizado no MED contemplou os efeitos de atrito, desgaste e geração de calor.

A associação de vários métodos para solução de problemas mais complexos tem sido um caminho natural, uma vez que nenhum método é capaz de reunir todas as características necessárias ao tratamento do conjunto de fenômenos físicos que estão envolvidos em determinados problemas. Nesta perspectiva, o MED tem importância fundamental, pela sua capacidade de simular o comportamento do meio descontínuo. Ainda que o MED seja um método de alto custo computacional, quando associado com outros métodos, como o MEF por exemplo, pode potencializar tanto o desempenho como as possibilidades de aplicações.

## **2.3 Formulação Numérica**

O modelo numérico de elemento discreto adotado segue a metodologia padrão estabelecida no trabalho de CUNDALL e STRACK [15] e HART *et al* [29], particularizando-se para o caso de modelagem utilizando o elemento discreto esférico, com tratamento do conjunto como um sistema de corpos rígidos. No seu primeiro trabalho, Cundall desenvolve um modelo bidimensional utilizando elementos em forma de discos e depois, juntamente com Hart, aborda um modelo tridimensional utilizando o poliedro irregular como forma geométrica para elemento.

A utilização do elemento esférico para modelos de grande porte proporciona um ganho de eficiência indispensável nesses casos. Essa eficiência se deve ao fato de haver apenas um ponto de contato possível entre dois elementos, à simplicidade de armazenar os dados dos elementos (grandezas relativas ao centróide e raio do elemento) e também à facilidade de se encontrar a direção normal ao plano de contato.

### **2.3.1 Caracterização Cinemática do Elemento**

No modelo adotado, o domínio tridimensional descontínuo é representado por um conjunto de esferas, que se comportam individualmente como corpo rígido. O elemento esférico possui seis graus de liberdade, sendo três translações e três rotações, definidos em um referencial inercial no espaço. Conforme a caracterização cinemática apresentada na Figura 2.2, o elemento “*i*” fica determinado pelos vetores posição  $r_i$ ,

velocidade linear  $v_i = \dot{r}_i$  e velocidade angular  $w_i = \dot{\theta}_i$ , referidos ao centróide do elemento.

A orientação da velocidade angular  $w_i$  é no sentido estabelecido pela regra da mão direita. Cabe ressaltar que as adições vetoriais envolvendo as velocidades angulares têm validade restrita ao caso de rotações infinitesimais [45]. Neste caso o incremento instantâneo nas rotações deve ser suficientemente pequeno para garantir a comutatividade na adição vetorial da velocidade angular. Mais detalhes referentes à dinâmica dos corpos rígidos no plano e no espaço podem ser encontrados em GINSBERG [26], que traz uma abordagem recente e bastante completa, nesta área.

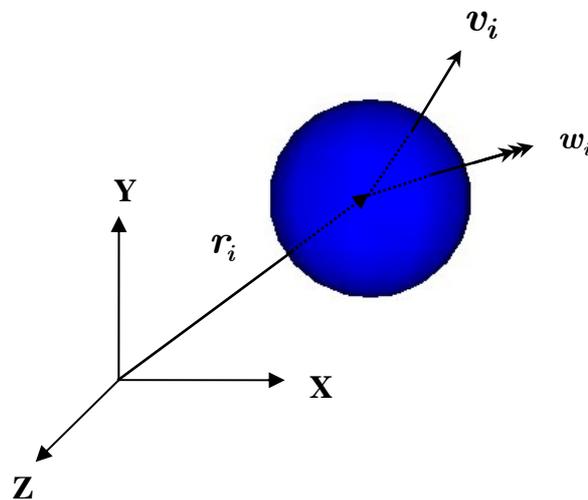


Figura 2.2 - Caracterização cinemática do elemento esférico.

### 2.3.2 Definição de Parede

Para simular a interferência dos elementos com obstáculos fixos ou móveis, define-se a parede rígida, que pode estar em contato com os elementos conforme a Figura 2.3. No exemplo da figura as paredes são utilizadas para delimitar um modelo de elemento discreto com forma cúbica, que está sendo gerado segundo uma técnica que será descrita adiante. As paredes são representadas por superfícies quadriláteras ou triangulares.

A caracterização da interação física se dá através do coeficiente de atrito, da constante elástica, e da força de adesão, que são os parâmetros de contato das paredes com os elementos. As equações de movimento não são resolvidas para as paredes de modo que suas acelerações e velocidades são funções conhecidas do sistema. Vale ressaltar que existe muito pouco detalhe sobre a definição e implementação de paredes na literatura, desse modo a definição adotada busca flexibilizar a introdução de contornos e obstáculos nos modelos.

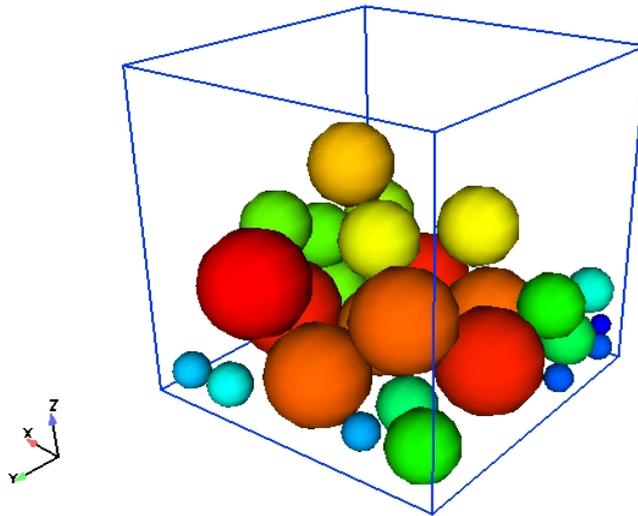


Figura 2.3 - Modelo de elemento discreto e interação com paredes.

### 2.3.3 Princípio da Impenetrabilidade

Segundo a dinâmica dos corpos rígidos, o movimento de elementos esféricos utilizados na modelagem estão sujeitos à restrição cinemática de impenetrabilidade. Para o contato entre elementos esta condição é verificada pela equações (2.2) e (2.3),

$$d_{ij} = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| - (a_i + a_j) \quad (2.2)$$

$$d_{ij} \geq 0 \quad (2.3)$$

onde,  $a_i$  e  $a_j$  são os raios dos elementos vizinhos “ $i$ ” e “ $j$ ”, sendo  $\mathbf{x}_i$  e  $\mathbf{x}_j$  as coordenadas dos seus centros de massa respectivamente, e  $d_{ij}$  representa a menor distância entre os dois elementos esféricos.

No caso de interação de elemento com a parede, sendo esta última representada por uma superfície, a condição de impenetrabilidade é verificada pelas equações (2.4) e (2.5), onde  $a_j$  e  $\mathbf{x}_j$  são respectivamente, o raio e as coordenadas do elemento “ $j$ ” próximo a parede “ $p_k$ ”. O ponto de coordenadas  $\mathbf{x}_{p_k}$  é o ponto de intersecção do plano da superfície com a reta normal ao plano e que passa por  $\mathbf{x}_j$ . Quando a projeção do ponto  $\mathbf{x}_j$  sobre o plano da superfície da parede estiver fora de seus limites, o ponto  $\mathbf{x}_{p_k}$  será o ponto do contorno da superfície mais próximo do elemento “ $j$ ”. Genericamente,  $d_{p_k,j}$  será sempre a menor distância entre a parede “ $p_k$ ” e o elemento “ $j$ ”.

$$d_{p_k,j} = \|\mathbf{x}_{p_k} - \mathbf{x}_j\| - a_j \quad (2.4)$$

$$d_{p_k,j} \geq 0 \quad (2.5)$$

### 2.3.4 Mecanismo do Contato

Nos meios descontínuos, quando considerados como sistema de partículas, as interações entre estas, em geral, são demasiadamente complexas e envolvem forças de natureza diversa, como força capilar em meio saturado, força eletromagnética em ambientes imersos nesses campos, força de natureza química, etc. Para efeito de aplicação são introduzidas as simplificações necessárias a esses mecanismos de interação, gerando diversos modelos que se adaptam ao tratamento de cada sistema.

O estudo do contato mecânico no trabalho de KIKUCHI e ODEN [42] tem uma abordagem bastante completa, sobretudo, nas aplicações que utilizam o método dos elementos finitos, contemplando problemas de pequenas e grandes deformações em regimes lineares e não lineares. WRIGGERS [66] reúne o que há de mais atual nas formulações para o contato mecânico, apresentando equações constitutivas para

interface do contato, que incluem diversos comportamentos físicos como desgaste, adesão e várias formas de atrito entre os materiais.

Nos modelos de interação por contato mecânico mais utilizados no MED consideram-se as forças oriundas das deformações e atrito entre partículas em colisão. Neste caso, existem duas formas de calcular as forças de contato durante a colisão, que podem ser classificadas como contato rígido (*hard contacts*) ou flexível (*soft contacts*) [27].

No contato rígido, uma formulação com multiplicadores de lagrange [23] é utilizada para impedir a interpenetração das partículas. Neste caso, as colisões são instantâneas, verificando-se rigorosamente a restrição cinemática de impenetrabilidade dadas pela equação (2.2) e pela equação (2.3). Além disso, a dissipação de energia na colisão é modelada utilizando o coeficiente de restituição.

No modelo de contato flexível, as colisões têm duração finita, admite-se uma deformação na região de contato e a dissipação de energia ocorre durante todo tempo de colisão. A força de contato é calculada utilizando um modelo aproximado segundo uma lei de força-deformação (penetração). Isto também pode ser visto como uma função de penalização, com a rigidez da mola representando a constante de penalização da penetração, e o amortecimento como uma penalização da taxa de penetração.

Nesta implementação foi utilizado o modelo de contato flexível para simular as interações entre as partículas e entre essas e as paredes. As partículas foram consideradas como corpos rígidos. Esta hipótese é importante, visto que ela viabiliza o estudo da maioria dos problemas práticos que envolvem um grande número de partículas. Nesses casos, as deformações locais nas partículas têm magnitude de ordem muito inferior àquelas observadas no conjunto e, de acordo com CUNDALL e STRACK [15], podem ser desprezadas sem prejuízo na análise do comportamento do sistema.

Para o tratamento das interações de contato entre as partículas, adotou-se uma lei de força-deformação, que será apresentada nas seções seguintes, onde a interpenetração é utilizada como uma aproximação dessa deformação no contato. Genericamente, nesta

técnica a força de contato é calculada através de uma função de penalização da penetração e da taxa de penetração entre as partículas. Em muitos casos a magnitude desta força é dada pela equação (2.6),

$$f = \kappa(d)d + c\dot{d} \quad (2.6)$$

onde a função  $\kappa$ , linear ou não linear dependendo do modelo considerado, depende da interpenetração  $d$  e representa a rigidez do contato, e  $c$  é uma constante associada à dissipação de energia durante a colisão. Assim, durante a colisão ou contato entre os elementos, a condição cinemática de impenetrabilidade para esferas rígidas dada pelas equações (2.4) e (2.3), é relaxada conforme ilustra a Figura 2.4 em um corte esquemático.

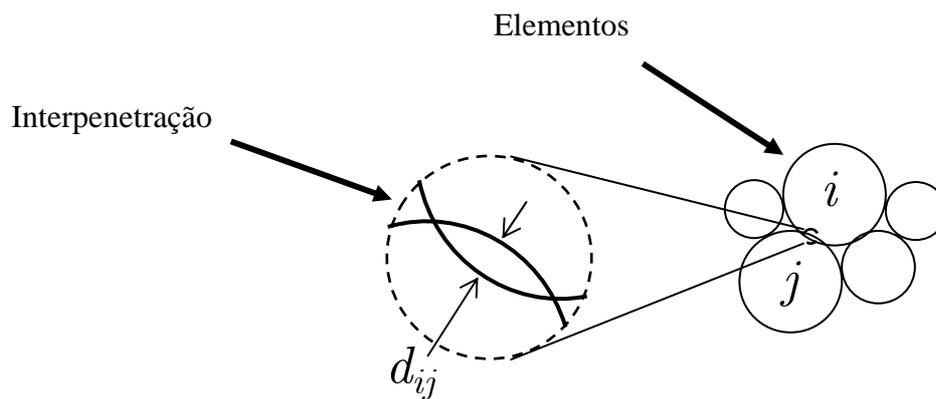


Figura 2.4 - Penetração permitida no contato entre elementos.

De modo semelhante há também um relaxamento da condição de impenetrabilidade entre elemento e parede conforme ilustra a Figura 2.5.

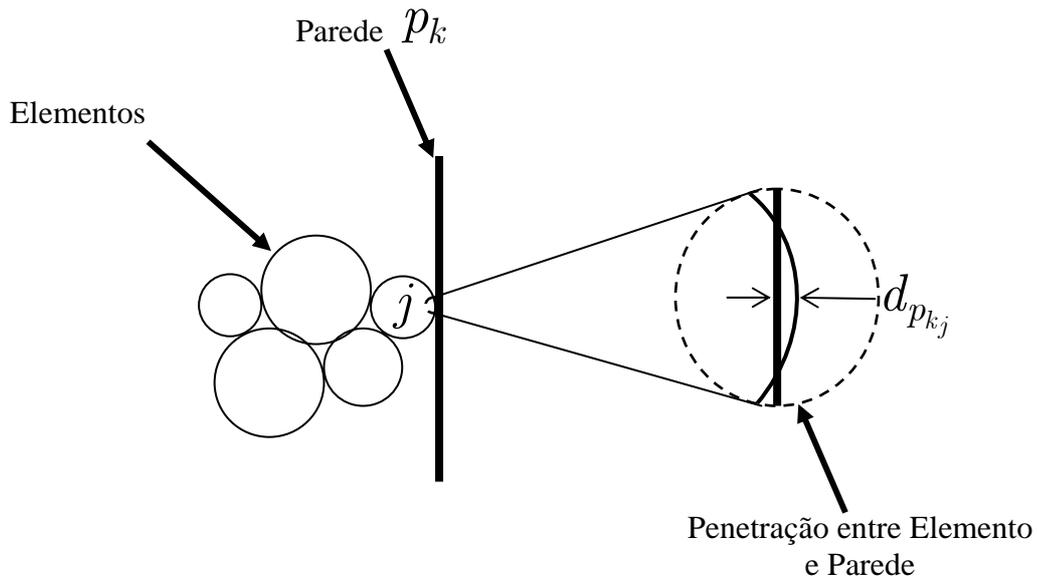


Figura 2.5 - Penetração permitida no contato entre parede e elementos.

Desta forma, com a utilização de um modelo de força-deformação (penetração), são calculadas as forças de interação no contato.

### 2.3.5 Cinemática do Contato

Quando há um movimento relativo entre dois elementos ou entre um elemento e uma parede, pode surgir um contato gerando uma força que age mutuamente interferindo em suas trajetórias. Para proceder ao cálculo desta interação no contato, é necessário estabelecer um sistema de referência local, onde são desenvolvidas as relações cinemáticas para o cálculo da força de contato. O sistema local é definido pela direção normal à superfície de contato e pela rotação que esta sofre em torno da normal. Para elementos esféricos a direção normal é coincidente com a ligação entre seus centróides.

Conforme mostra a Figura 2.6, a origem do sistema é um ponto da superfície da partícula  $i$ , que é tomada como referência para fixação do sistema. Assim, o eixo  $\hat{X}$  local é dado pela direção normal no sentido do centróide  $i$  para o centróide  $j$ .

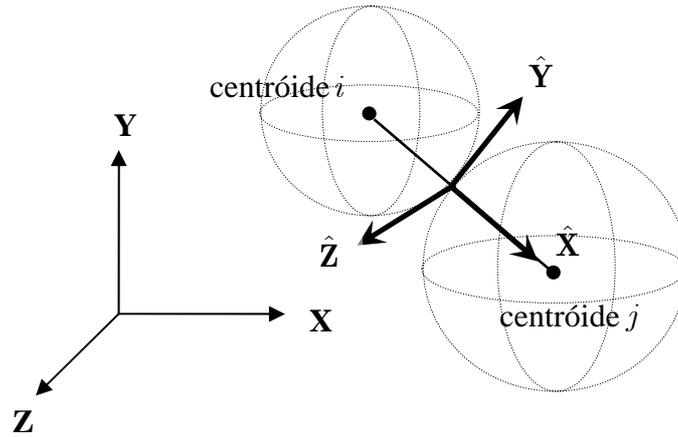


Figura 2.6 - Sistema de referência local para o contato entre os elementos.

O desenvolvimento da matriz de rotação utilizada na transformação de coordenadas, do sistema global para o sistema local, é semelhante ao apresentado por GERE e WEAVER [25] para rotação de uma barra no espaço. Neste caso, existem duas definições para matriz de rotação, onde uma delas se aplica aos contatos de um modo geral, com exceção daqueles cuja orientação da normal for vertical. E conseqüentemente a outra definição se aplica aos casos onde a orientação normal do contato for vertical. Desta forma a matriz para os contatos não verticais é dada por:

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} c_x & c_y & c_z \\ \frac{-c_x c_y \cos \varphi - c_z \text{sen} \varphi}{\sqrt{c_x^2 + c_z^2}} & \sqrt{c_x^2 + c_z^2} \cos \varphi & \frac{-c_y c_z \cos \varphi + c_x \text{sen} \varphi}{\sqrt{c_x^2 + c_z^2}} \\ \frac{c_x c_y \text{sen} \varphi - c_z \cos \varphi}{\sqrt{c_x^2 + c_z^2}} & -\sqrt{c_x^2 + c_z^2} \text{sen} \varphi & \frac{c_y c_z \text{sen} \varphi + c_x \cos \varphi}{\sqrt{c_x^2 + c_z^2}} \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

A matriz para os contatos verticais é dada por:

$$\mathbf{R}_{\text{vert}} = \begin{bmatrix} 0 & c_y & 0 \\ -c_y \cos \varphi & 0 & \text{sen} \varphi \\ c_y \text{sen} \varphi & 0 & \cos \varphi \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

onde  $c_x$ ,  $c_y$ ,  $c_z$  são os co-senos diretores da normal e  $\varphi$  é rotação do elemento  $i$  em relação à normal desde o instante em que se deu o início do contato, até o instante corrente. Com a definição da matriz de rotação, as coordenadas, velocidade linear e angular de cada elemento podem ser escritas no sistema local, onde são calculadas as forças de interação no contato através das relações cinemáticas.

Uma formulação para as relações cinemáticas do problema de contato entre corpos deformáveis foi desenvolvida por WRIGGERS [66]. Estas relações são utilizadas na modelagem do contato entre corpos contínuos pelo MEF. Para simulações com elementos discretos a força de contato é baseada em modelos simplificados de rigidez e amortecimento, associados ao deslocamento relativo dos centróides dos corpos em contato. Sendo assim, em se tratando do caso particular de contato entre corpos rígidos esféricos, a definição das funções de penetração, bem como suas taxas, são suficientes para estabelecer as relações cinemáticas do contato num sistema de partículas.

As relações cinemáticas são estabelecidas no referencial local conforme definição da Figura 2.6 para contatos entre elementos, ou conforme Figura 2.9 para contato entre elemento e parede. Estas relações são definidas através do deslocamento relativo dos centróides após o início do contato de acordo com a Figura 2.7, em termos dos vetores unitários ortogonais  $n$  direção da força normal coincidente com eixo local  $\hat{X}$ , e  $t$  direção da força tangencial no plano dos eixos locais  $\hat{Y}$  e  $\hat{Z}$ .

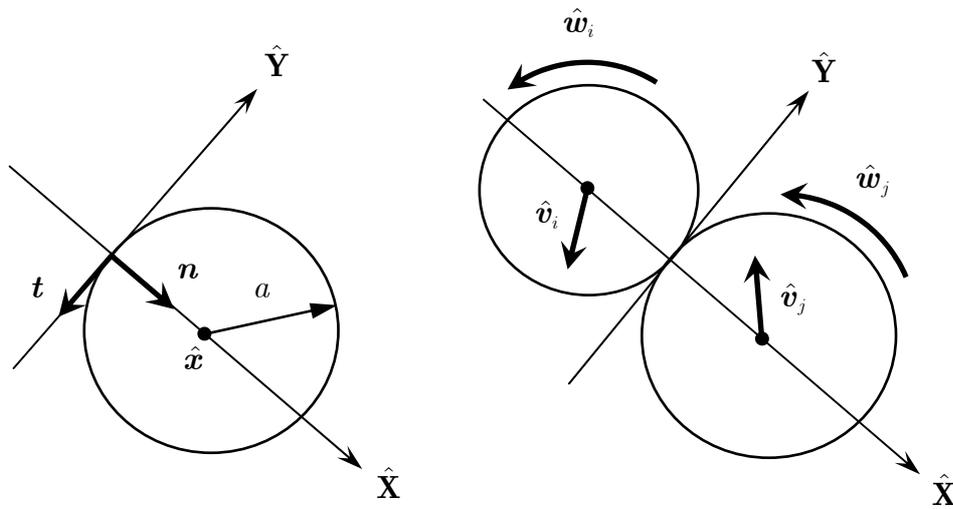


Figura 2.7 - Caracterização cinemática do contato.

A velocidade relativa normal é dada por,

$$\hat{v}^n = (\hat{v}_{\hat{x}_j} - \hat{v}_{\hat{x}_i}) \quad (2.9)$$

com a definição da velocidade relativa, o deslocamento relativo é obtido pela integração temporal dessa velocidade, desde o início do contato em  $T^i$  até um determinado tempo  $T$  durante a colisão, conforme a equação (2.10).

$$\hat{u}^n = \int_{T^i}^T \hat{v}^n dT \quad (2.10)$$

A avaliação numérica da integral na equação (2.10), desde o início do contato até o passo de tempo corrente, é dada pelo valor da interpenetração. Assim, o deslocamento relativo é calculado através da equação (2.11), onde  $a$  é o raio de cada elemento, e  $\hat{x}$  a coordenada x local dos centróides.

$$\hat{u}^n = (a_i + a_j) - |\hat{x}_j - \hat{x}_i| \quad (2.11)$$

A velocidade relativa tangencial, é dada por:

$$\hat{\mathbf{v}}^t = ((\hat{\mathbf{v}}_j - \hat{\mathbf{v}}_i) \cdot \mathbf{t})\mathbf{t} - (a_j\hat{\mathbf{w}}_j + a_i\hat{\mathbf{w}}_i) \times \mathbf{n} \quad (2.12)$$

Com a integração da velocidade, obtém-se o deslocamento relativo durante o intervalo de tempo  $(T - T^i)$ , como indica a equação (2.13),

$$\hat{\mathbf{u}}^t = \int_{T^i}^T \hat{\mathbf{v}}^t dT . \quad (2.13)$$

A aplicação da lei clássica de atrito de Coulomb à força tangencial, pode gerar oscilações não físicas na solução numérica da força de atrito [51]. A lei clássica é mostrada na Figura 2.8 (a). Assim, é aplicada a lei de atrito de Coulomb regularizada à magnitude da força tangencial. Esta lei é mostrada na Figura 2.8 (b).

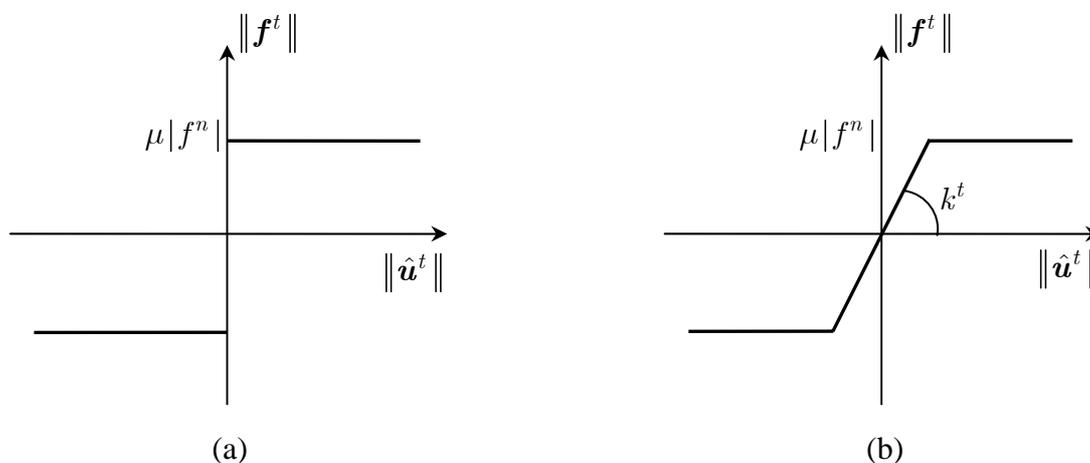


Figura 2.8 - Lei de atrito de Coulomb: (a) clássica e (b) regularizada.

Desta forma, a força tangencial é calculada através de um processo incremental, substituindo a integral da equação (2.13), pela somatório dos incrementos de deslocamento relativo, dado pela equação (2.14),

$$\hat{\mathbf{u}}^t = \sum_T \hat{\mathbf{v}}^t \Delta T \quad (2.14)$$

onde  $\Delta T$  é passo de tempo da análise.

Quando a força tangencial atinge o valor máximo para força de atrito, ou seja  $\|\mathbf{f}^t\| > \mu|f^n|$ , inicia-se um deslizamento entre as partículas descrito por um retorno radial dado por,

$$\mathbf{f}^t = \tau(f^n) \frac{\mathbf{f}_{T-\Delta T}^t - k^t \hat{\mathbf{v}}^t \Delta T}{\|\mathbf{f}_{T-\Delta T}^t - k^t \hat{\mathbf{v}}^t \Delta T\|} . \quad (2.15)$$

Durante o deslizamento, o deslocamento tangencial relativo total se divide em duas parcelas, uma reversível e outra irreversível [51]. Este deslocamento irreversível pode ser entendido como sendo a trajetória de deslizamento do ponto de contato de um corpo sobre a superfície do outro. Neste caso, o deslocamento relativo acumulado correspondente à parcela reversível é dado por:

$$\hat{\mathbf{u}}^t = \frac{\mathbf{f}^t}{k^t} \quad (2.16)$$

De forma análoga, são desenvolvidas as grandezas cinemáticas para contato entre parede e elemento, onde o ponto de contato na parede  $p$  é a origem do sistema de referência como ilustra a Figura 2.9. Neste caso o deslocamento relativo normal é calculado por,

$$\hat{u}^n = a - |\hat{x}_p - \hat{x}_i| \quad (2.17)$$

e a velocidade relativa tangencial, é dada por:

$$\hat{\mathbf{v}}^t = ((\hat{\mathbf{v}}_j - \hat{\mathbf{v}}_p) \cdot \mathbf{t})\mathbf{t} - a_j \hat{\mathbf{w}}_j \times \mathbf{n} \quad (2.18)$$

Enquanto não ocorre deslizamento o deslocamento relativo é obtido da mesma forma pela equação (2.14), e durante o deslizamento pela equação (2.16).

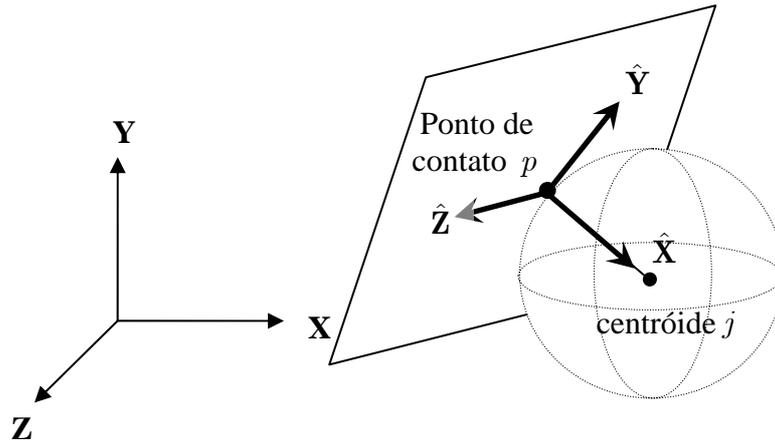


Figura 2.9 - Sistema de referência local para o contato elemento-parede.

### 2.3.6 Equações Constitutivas

As grandezas cinemáticas vistas no item anterior, ou seja, os deslocamentos relativos  $\hat{u}^n$  e  $\hat{u}^t$  e as velocidades relativas  $\hat{v}^n$  e  $\hat{v}^t$  estão relacionadas com a força de contato através das equações constitutivas (2.19) e (2.20). Assim, obtém-se a força de interação no contato segundo o referencial local. As equações constitutivas são:

$$f^n = k^n \hat{u}^n + c^n \hat{v}^n \quad (2.19)$$

$$f^t = k^t \hat{u}^t + c^t \hat{v}^t \quad (2.20)$$

onde  $k$  é um operador linear ou não linear, relacionado com as propriedades físicas utilizadas na simulação do contato, que descreve seu comportamento elástico. A constante  $c$  é coeficiente de amortecimento viscoso que atenua a amplitude de oscilação da força de contato. Esses parâmetros dependem das propriedades micro-mecânicas do material que constitui cada elemento e parede que formam o par em contato.

Nos casos dos contatos entre materiais distintos, utiliza-se o parâmetro resultante calculado pela média harmônica, aritmética, valor máximo ou mínimo, dependendo da propriedade física. A idealização do modelo de força de contato, permite estabelecer o operador  $k$  e o coeficiente  $c$ , que caracterizam fisicamente o material que será simulado. Este modelo será discutido na seção seguinte e constitui-se fundamentalmente do efeito de deformação elástica, do amortecimento viscoso, da dissipação por atrito na componente tangencial (Lei de atrito de Coulomb), e da energia de adesão.

### 2.3.7 Modelo de Força de Contato

Vários modelos de força de contato são encontrados na literatura. CUNDALL e STRACK [15] propôs um modelo que combinava uma lei de força-deslocamento linear (Lei de Hooke), com uma força de amortecimento viscoso proporcional à velocidade relativa dos elementos em contato. Nesse modelo, a componente tangencial é limitada por um valor crítico, segundo a Lei de Atrito de Coulomb, permitindo deslizamentos entre os elementos.

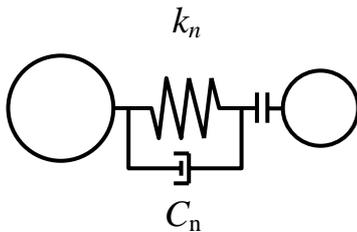
Existem modelos baseados em leis de força-deslocamento não linear, como os que têm a força de contato normal de acordo com a Teoria de Hertz e a força de contato tangencial segundo a Teoria de Mindlin. THORNTON e YIN [61] propõem um modelo de força para esferas elásticas que considera forças de adesão. Posteriormente THORNTON e NING [60] num modelo mais sofisticado consideram o comportamento adesivo e elastoplástico do contato entre esferas.

Em geral o modelo para a força de contato está associado ao comportamento micro-mecânico do material em análise. Em escala de grãos ou partículas, as forças de interação envolvidas são demasiadamente complexas, conseqüentemente os modelos de força de contato buscam a melhor aproximação possível dessas forças, de modo que os seus efeitos em escalas superiores sejam semelhantes. Assim, esse aspecto deve ser considerado na escolha do modelo, como é o caso do trabalhos de SADD *et al* [58] e LIU *et al* [40].

A Figura 2.10 apresenta o análogo do modelo mais comum de força de contato empregado no Método dos Elementos Discretos. Nesta figura estão representadas a

contribuição elástica através da mola, o amortecimento viscoso e o deslizamento tangencial com aplicação da lei de atrito de Coulomb. A mola pode apresentar comportamento linear ou não linear, e ainda possuir resistência à tração, quando existem forças adesivas, ou caso contrário absorva apenas esforços de compressão.

Modelo da força normal



Modelo da força tangencial

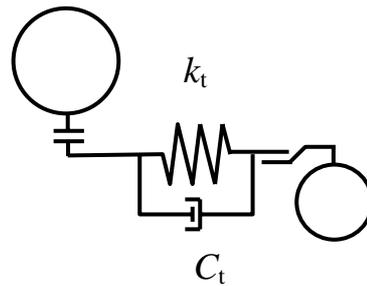


Figura 2.10 - Modelo esquemático da força de contato.

Nessa implementação procurou-se adotar um modelo de força de contato que incorporasse boa parte dos efeitos micro-mecânicos já estudados, evitando-se apenas aqueles de tratamento numérico mais difícil em face da contribuição agregada ao modelo. Contudo, outros modelos podem ser incorporados conforme a necessidade de cada aplicação.

O modelo utilizado é semelhante ao que foi proposto por CUNDALL e STRACK [15], com adição de mais um termo no modelo de força normal, para que pudesse contemplar partículas aderentes como sugere LIU *et al* [40]. Adicionou-se ainda nesse modelo na parcela de contribuição elástica normal, uma parcela não linear para o domínio das forças de tração. A Figura 2.11 mostra os gráficos de força normal versus penetração os modelos de Cundall, Liu e para o modelo adotado na implementação.

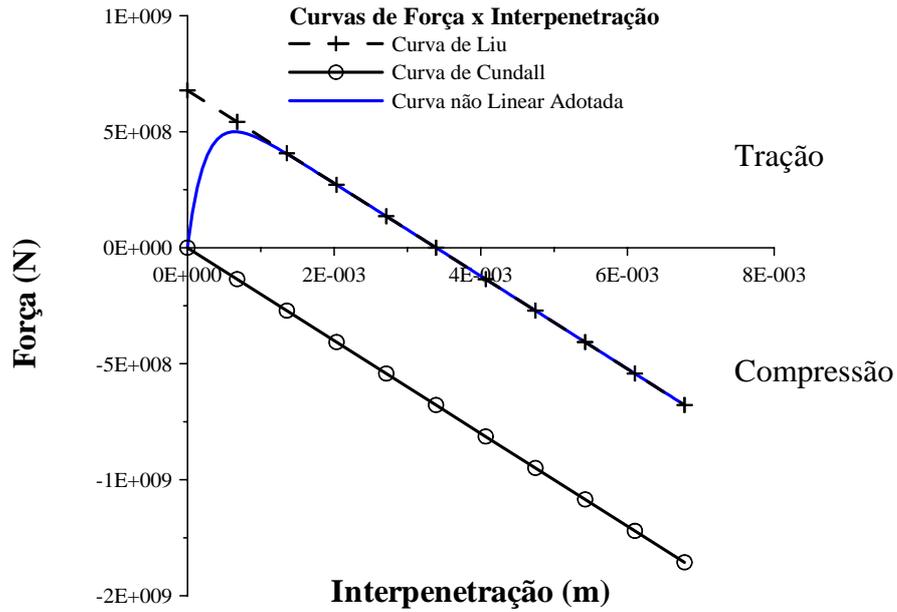


Figura 2.11 - Curvas típicas dos modelos de força de contato.

Como pode ser observado, a curva para o modelo de Cundall trata-se de uma relação de elasticidade linear (Lei de Hooke), sem resistência à tração (sem adesão), com o parâmetro  $k^n$  constante. O modelo de Liu tem a mesma lei linear acrescentando-se uma resistência à tração (adesão). Neste caso, a força apresenta uma descontinuidade quando a deformação máxima de tração é atingida. É importante observar no modelo de Liu que, devido a essa descontinuidade da força, ao se atingir a resistência máxima à tração, há uma brusca ruptura da mola, e se não houver capacidade suficiente de absorção dessa energia através das forças dissipativas esse efeito desestabiliza o sistema. Os parâmetros de contato para esse modelo devem ser calibrados de modo a evitar esse tipo de instabilidade, para que não haja acréscimo de energia no sistema que leve à divergência da solução.

Para o modelo de contato proposto por Liu, o vetor que define a força normal é determinado por,

$$f^n = -k^n \hat{u}^n + c^n \hat{v}^n + P \quad (2.21)$$

onde  $k^n$  e  $c^n$  são respectivamente a constante elástica e o coeficiente de viscosidade na direção normal, e  $P$  é a força de adesão.

No modelo adotado para força normal, a parcela devido à adesão é dependente da deformação através de uma lei não linear, com parâmetros fixos  $\alpha$  e  $\delta$ . Essa força é calculada através de,

$$f^n = -k^n \left( \hat{u}^n - (1 - e^{-\alpha \hat{u}^n}) \delta \right) + c^n \hat{v}^n. \quad (2.22)$$

Uma escolha adequada dos parâmetros  $\alpha$  e  $\delta$  permite avaliar diversas formas para o comportamento elástico. Uma alternativa interessante é estabelecê-los em função do módulo elástico  $k^n$ , da força máxima de tração  $F$  e a constante  $\varepsilon$ , isto é,

$$\delta = - \frac{F \ln(\varepsilon)}{k^n \left( -\ln\left(\frac{-1}{\ln(\varepsilon)}\right) + \ln(\varepsilon) + 1 \right)} \quad (2.23)$$

$$\alpha = - \frac{\ln(\varepsilon)}{\delta} \quad (2.24)$$

O parâmetro  $\varepsilon$  é tal que ( $0 < \varepsilon < 1$ ). A Figura 2.12 apresenta várias curvas utilizando-se diversos valores para  $\varepsilon$ . Quando essa constante se aproxima de zero, o aspecto da curva fica similar ao modelo de Liu, ao passo que se  $\varepsilon$  tende a 1 observamos que a curva se aproxima ao modelo de Cundall.

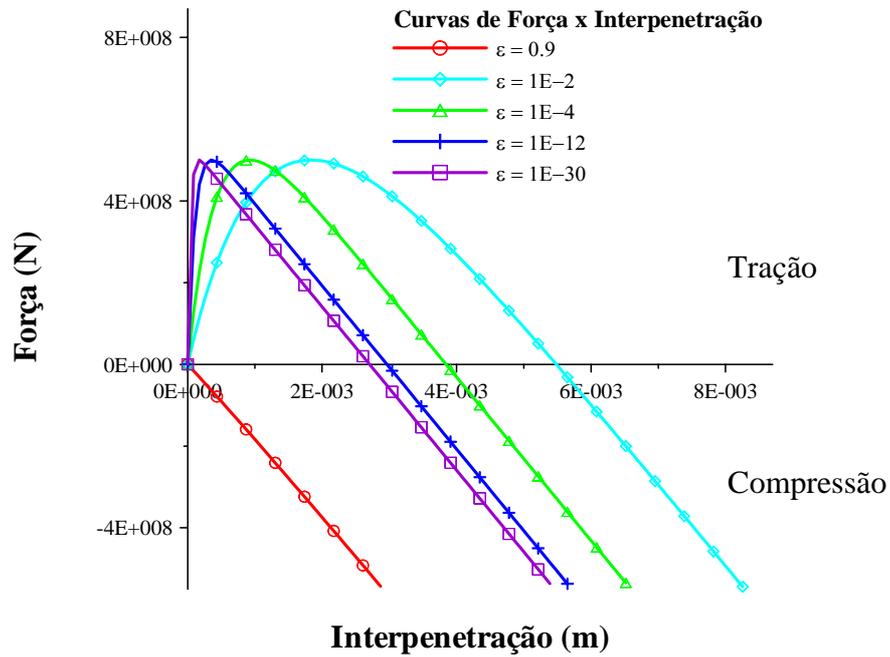


Figura 2.12 - Curvas da relação força versus penetração com variação de  $\varepsilon$ .

Em alguns casos de simulações em meios descontínuos, há ainda uma dependência da história de deformação na força de contato. Um exemplo típico é a modelagem voltada para o estudo de fratura de materiais como rochas e solos. Nesse caso, a força de tração no modelo de contato perde seu efeito após a ruptura. Com isso, se no início da análise existe um par de elementos em contato, a tração entre eles cessa após a separação, e numa eventual colisão posterior só atuará compressão e atrito. Na implementação esse problema é tratado com a introdução de uma função que verifica se o par corrente de contato já existia continuamente desde o início da análise, anulando ou não a parcela de força de tração. Neste caso, com a introdução desta função na equação (2.22) temos:

$$f^n = -k^n \left( \hat{u}^n - \Phi \left( 1 - e^{-\alpha \hat{u}^n} \right) \delta \right) + c^n \hat{v}^n \quad (2.25)$$

onde esta função é  $\Phi = 1$  para todos os contatos iniciais, se anulando, ou seja  $\Phi = 0$ , quando estes contatos são rompidos.

O cálculo da força tangencial segue o modelo usual, com uma parcela de força elástica e uma força de amortecimento, ou seja,

$$\mathbf{f}^t = \begin{cases} k^t \hat{\mathbf{u}}^t + c^t \hat{\mathbf{v}}^t & \xrightarrow{se} \|\mathbf{f}_{T-\Delta T}^t - k^t \hat{\mathbf{v}}^t \Delta T\| \leq \tau(f^n) \\ \tau(f^n) \frac{\mathbf{f}_{T-\Delta T}^t - k^t \hat{\mathbf{v}}^t \Delta T}{\|\mathbf{f}_{T-\Delta T}^t - k^t \hat{\mathbf{v}}^t \Delta T\|} & \xrightarrow{se} \|\mathbf{f}_{T-\Delta T}^t - k^t \hat{\mathbf{v}}^t \Delta T\| > \tau(f^n) \end{cases} \quad (2.26)$$

onde  $k^t$  é a constante elástica e  $c^t$  é o coeficiente de dissipação viscosa. O módulo da força tangencial é limitado segundo a Lei de atrito de Coulomb regularizada para uma dada magnitude de força normal, veja Figura 2.8 (b). No instante em que o módulo desta força supera o valor máximo igual a  $\tau(f^n)$ , adota-se um retorno radial para superfície de ruptura. A função que define a superfície de ruptura  $\tau$ , através do coeficiente de atrito, coesão e resistência à tração é mostrada na Figura 2.13.

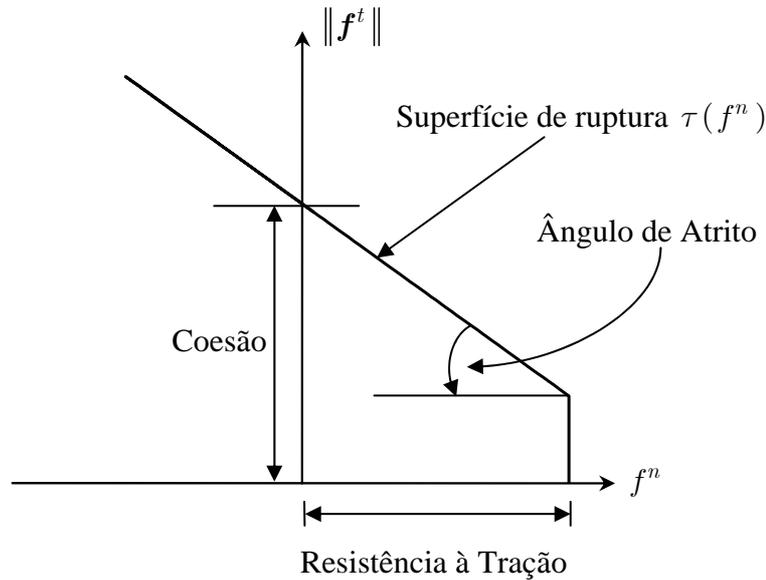


Figura 2.13 - Superfície de ruptura adotada.

Os parâmetros físicos  $c^n$  e  $c^t$  refletem uma dissipação de energia durante as colisões, que é difícil de determinar diretamente. Porém, eles podem ser calculados em termos dos respectivos coeficientes de restituição  $\eta^n$  e  $\eta^t$ , os quais são obtidos em ensaios experimentais. Para os casos onde não há força de adesão, esse coeficiente de amortecimento pode ser calculado através da seguinte equação, conforme o trabalho de TSUJI *et al* [63],

$$c^n = 2\gamma^n \sqrt{mk^n} \quad (2.27)$$

onde  $\gamma^n$  e  $m$  são dados por:

$$\gamma^n = -\frac{\ln(\eta^n)}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2(\eta^n)}} \quad (2.28)$$

$$m = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} \quad (2.29)$$

com  $m_i$  e  $m_j$  sendo as massas das partículas. As equações acima são desenvolvidas através da solução analítica da equação do movimento para o sistema de duas partículas. De forma semelhante,  $c^t$  pode ser obtido por estas equações substituindo o índice  $n$  por  $t$ . THORNTON e NING [27] desenvolveram o cálculo do coeficiente de restituição do contato entre esferas considerando o modelo elastoplástico com adesão. Neste caso, o desenvolvimento não fornece explicitamente uma relação com as constantes viscosas.

### 2.3.8 Equações do Movimento

A força de contato estabelecida no sistema local é transformada para o sistema global. Aplica-se então esta força, bem como sua recíproca na equação de movimento dos elementos envolvidos no contato. Assim temos que:

$$\mathbf{F}_i = \mathbf{R}^\top(\mathbf{f}^n + \mathbf{f}^t) \quad (2.30)$$

$$\mathbf{F}_j = -\mathbf{F}_i \quad (2.31)$$

Determina-se a força de contato resultante em cada elemento somando-se as contribuições de todos os contatos dos quais ele participa. Assim, considerando o efeito da gravidade sobre o sistema, e aplicando a segunda lei de Newton, a equação abaixo descreve o movimento linear de cada elemento do sistema,

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i + C^r \dot{\mathbf{r}}_i = \sum_k \mathbf{F}_{ik} + m_i \mathbf{g} \quad (2.32)$$

onde  $m_i$ ,  $\ddot{\mathbf{r}}_i$ ,  $C^r$  e  $\dot{\mathbf{r}}_i$  são respectivamente a massa, aceleração, coeficiente global de amortecimento do movimento de translação e velocidade do elemento “ $i$ ”,  $\mathbf{F}_i$  é a força de contato e  $k$  é número de contatos com o elemento, e  $\mathbf{g}$  é a aceleração da gravidade.

O torque estabelecido no sistema local é transformado para o sistema global. Aplica-se então este torque, bem como seu recíproco na equação do movimento angular dos elementos envolvidos no contato. Assim temos que:

$$\mathbf{M}_i = \mathbf{R}^\top (\mathbf{f}^t \times a_i \mathbf{n}) \quad (2.33)$$

$$\mathbf{M}_j = \frac{a_j}{a_i} \mathbf{M}_i \quad (2.34)$$

Determina-se o torque resultante em cada elemento somando-se as contribuições de todos os contatos dos quais ele participa. Assim, o movimento angular de cada elemento do sistema é dado por,

$$I_i \ddot{\boldsymbol{\theta}}_i + C^\theta \dot{\boldsymbol{\theta}}_i = \sum_k \mathbf{M}_{ik} \quad (2.35)$$

onde  $I_i$ ,  $\ddot{\boldsymbol{\theta}}_i$ ,  $C^\theta$  e  $\dot{\boldsymbol{\theta}}_i$  são respectivamente o momento de inércia, aceleração, coeficiente global de amortecimento do movimento de rotação e velocidade angular do elemento,  $\mathbf{M}_i$  é o torque e  $k$  é número de contatos com o elemento.

## 2.4 Efeito do Amortecimento

O amortecimento viscoso presente nas forças de contato causa uma rápida absorção das vibrações de alta frequência. Esse efeito é importante para a estabilização do sistema que, juntamente com a dissipação que ocorre durante o deslizamento tangencial, leva o modelo de elemento discreto ao equilíbrio depois de cessado o carregamento. A Figura 2.14 mostra o gráfico de velocidade com o tempo para a interação entre um elemento e uma parede, onde são ilustrados os efeitos do amortecimento viscoso (penalização da taxa de penetração). Neste exemplo uma partícula está inicialmente tangente à superfície horizontal, como mostra a ilustração no gráfico, e então é submetida à ação da gravidade. Os parâmetros físicos utilizados no exemplo estão resumidos na Tabela 1. Pode ser observada uma redução de 50% na amplitude da velocidade relativa (taxa de penetração) a cada ciclo de oscilação.

Avaliação do efeito do amortecimento	
Propriedades Físicas	Valor
Módulo elástico normal $k^n$ (N/m)	$2 \times 10^7$
Módulo elástico tangencial $k^t$ (N/m)	$2 \times 10^7$
Ângulo de atrito $\phi$ (graus)	$34^\circ$
Força de coesão (N)	0.1
Massa específica $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	2000
Coefficiente de restituição normal $\eta^n$	-
Coefficiente de restituição tangencial $\eta^t$	-
Força de tração máxima $F$ (N)	$1 \times 10^3$
Parâmetro $\varepsilon$ da curva de $f^n$	$1 \times 10^{-4}$

Tabela 1 - Parâmetros de simulação.

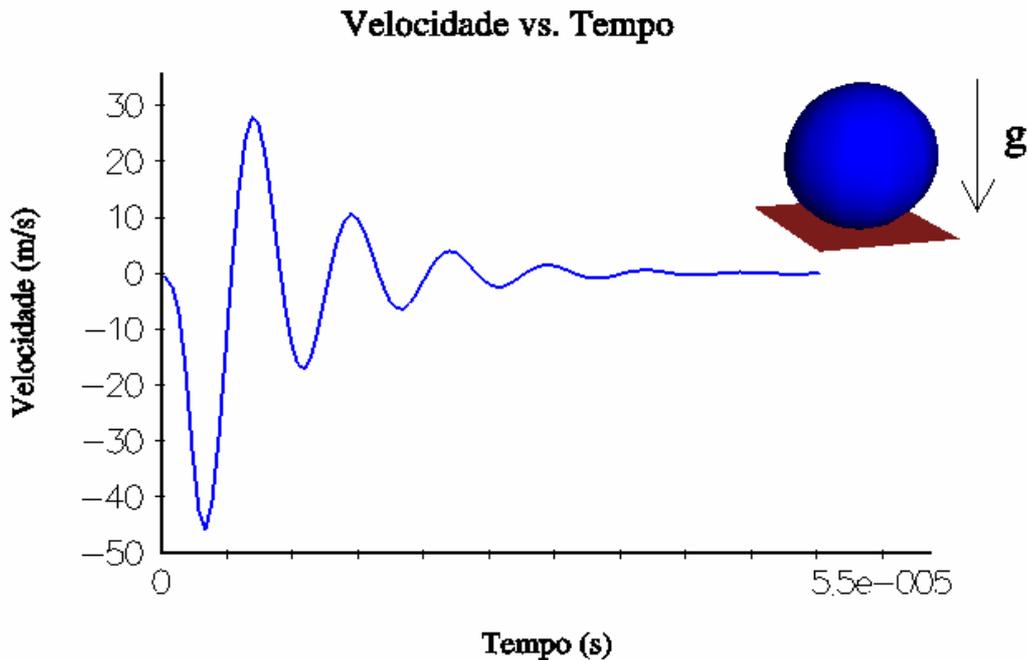


Figura 2.14 - Efeito do amortecimento com coeficiente de restituição igual a 0.5.

A Figura 2.15 mostra o gráfico de velocidade com o tempo para o mesmo problema anterior, considerando agora um amortecimento maior. Neste caso, foram utilizados os mesmos parâmetros, alterando-se apenas o coeficiente de restituição para  $10^{-7}$ .

O estado de equilíbrio inicial de um modelo de MED, que contemple a resistência à tração, possui uma certa quantidade de energia associada às forças de adesão. Quando essa energia vai sendo liberada através da quebra dos contatos, o amortecimento tem o importante papel de dissipá-la. A taxa de dissipação de energia no sistema, estabelecida pelos parâmetros de amortecimento, pode ser insuficiente para estabilizá-lo, sobretudo em caso de impacto em alta velocidade. Nestes casos, formulações que incorporam efeitos termodinâmicos [35], [36] são mais apropriadas.

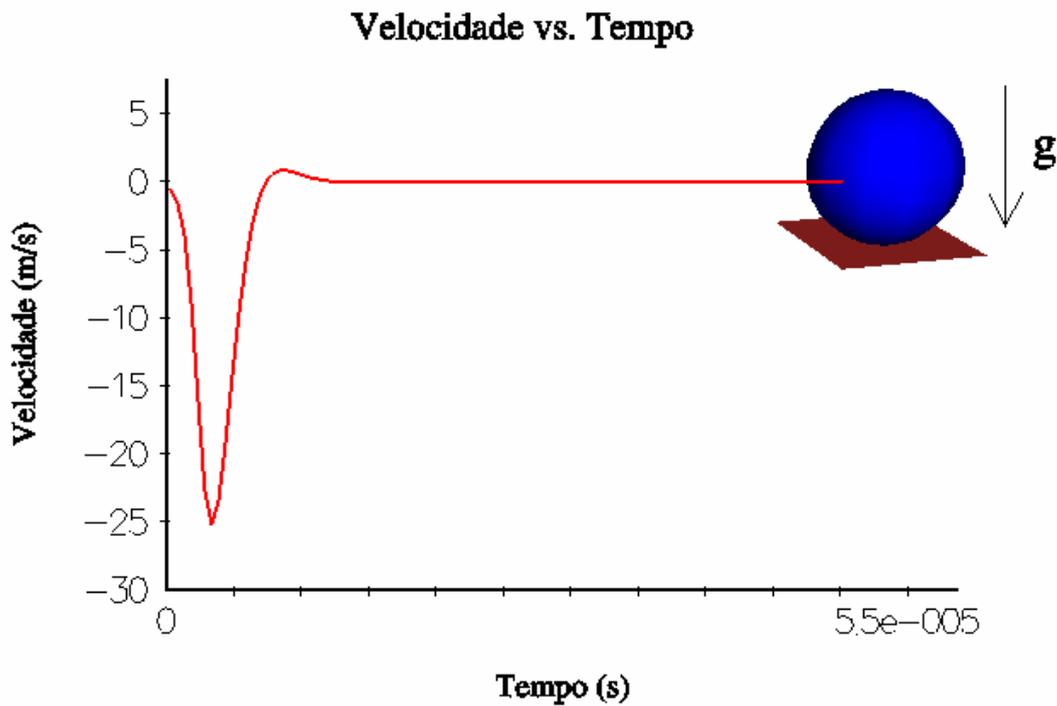


Figura 2.15 - Efeito do amortecimento com coeficiente de restituição igual a  $10^{-7}$ .

Na maioria das aplicações do MED, além desses parâmetros de viscosidade que atuam sobre a velocidade relativa, ainda é necessário um amortecimento que absorva a energia das baixas frequências. Para isso, é então incorporado o coeficiente de amortecimento global, que opera sobre as velocidades absolutas de translação e de rotação de cada elemento. Na implementação, foram considerados os coeficientes de amortecimento global de translação  $C^r$  e rotação  $C^\theta$ , os quais são inseridos nas equações (2.32) e (2.35) que descrevem esses movimentos.

## 2.5 Esquema de Integração no Tempo

Vários métodos de integração no tempo podem ser utilizados no MED para solucionar as equações de movimento. A maioria dos pesquisadores adota o método explícito de integração numérica, pois este possui muitas vantagens em relação aos métodos implícitos. Não há necessidade de armazenar a matriz de rigidez global que, no caso do esquema de integração implícito, teria que ser atualizada a cada passo de tempo. Como os pares de contatos podem mudar de forma arbitrária durante a evolução no tempo, a execução da fase de correção torna-se extremamente cara, já que teria que ser feita uma busca na história dos pares de contato. Para o método explícito de integração os cálculos em um passo de tempo são bem mais rápidos do que no esquema implícito. Porém, pelo fato de ser condicionalmente estável, freqüentemente requer passos de tempo muito pequenos. Por outro lado, como o sistema é fortemente não linear, devido às forças viscosas e ao alto gradiente nas mesmas, o método implícito vai exigir passo de tempo pequeno para uma boa aproximação da solução.

Nesta implementação, adotou-se o esquema explícito de diferenças finitas. Os coeficientes de viscosidade global  $C^r$  e  $C^\theta$ , são considerados proporcionais à  $m_i$  e  $I_i$ , respectivamente, de acordo com as equações (2.36) e (2.37).

$$C^r = \alpha^r m_i \quad (2.36)$$

$$C^\theta = \alpha^\theta I \quad (2.37)$$

Escrevendo as expressões de aproximação, por diferenças finitas, para primeira e segunda derivada nas equações (2.32) e (2.35). Além disso substituindo (2.36) e (2.37) nas equações (2.32) e (2.35) respectivamente, o esquema de integração para o movimento de translação pode ser escrito pelas equações (2.38), (2.39) e (2.40), isto é,

$$\ddot{\mathbf{r}}_i^n = \frac{\sum_k \mathbf{F}_{ik}}{m_i} + \mathbf{g} \quad (2.38)$$

$$\dot{\mathbf{r}}_i^{n+1} = (a\dot{\mathbf{r}}_i^n + \ddot{\mathbf{r}}_i^n \Delta t)b \quad (2.39)$$

$$\mathbf{r}_i^{n+1} = \mathbf{r}_i^n + \dot{\mathbf{r}}_i^{n+1} \Delta t \quad (2.40)$$

onde os parâmetros  $a$  e  $b$  são dados por,

$$a = 1 - \frac{\alpha^r \Delta t}{2} \quad (2.41)$$

$$b = \left(1 + \frac{\alpha^r \Delta t}{2}\right)^{-1} \quad (2.42)$$

Para o movimento de rotação o esquema de integração pode ser escrito como,

$$\ddot{\theta}_i^n = \frac{\sum_k M_{ik}}{I_i} \quad (2.43)$$

$$\dot{\theta}_i^{n+1} = (c\dot{\theta}_i^n + \ddot{\theta}_i^n \Delta t)d \quad (2.44)$$

$$\theta_i^{n+1} = \theta_i^n + \dot{\theta}_i^{n+1} \Delta t \quad (2.45)$$

com  $c$  e  $d$  dados por,

$$c = 1 - \frac{\alpha^\theta \Delta t}{2} \quad (2.46)$$

$$d = \left(1 + \frac{\alpha^\theta \Delta t}{2}\right)^{-1} \quad (2.47)$$

O esquema de integração numérica adotado é estável quando  $\Delta t \leq \Delta t_c$ , onde  $\Delta t_c$  é passo de tempo crítico, que pode ser estimado baseando-se na frequência de oscilação

de um sistema com um grau de liberdade. Empregou-se a estimativa proposta por HART *et al* [29], que é calculada por,

$$\Delta t = FRAC \cdot 2 \sqrt{\frac{M_{\min}}{2K_{\max}}} \quad (2.48)$$

onde  $M_{\min}$  é a menor massa e  $K_{\max}$  é a maior constante elástica normal ou tangencial presente no modelo. O parâmetro  $FRAC$  controla a possibilidade de um elemento participar de vários contatos. Cundall afirma, com base em vários experimentos numéricos, que o valor de  $FRAC$  igual 0.1 é suficiente para garantir a estabilidade numérica. Nesta implementação, o passo de tempo é calculado automaticamente através da equação (2.48) utilizando o parâmetro  $FRAC$  igual 0.1.

# Capítulo 3

## Implementação Computacional

Neste capítulo, serão abordados alguns aspectos da implementação computacional. Apresenta-se a estrutura de dados adotada e as técnicas de otimização computacional utilizadas. As características dos meios descontínuos analisados através do Método dos Elementos Discretos, fazem com que esse problema se enquadre na classe dos mais difíceis para desenvolvimento em plataformas de alto desempenho. Este fato ressalta a importância da busca de estratégias de implementação, com o objetivo de otimizar as análises. Sobretudo potencializando o desempenho através de bom nível de vetorização e paralelização do código.

### 3.1 Classificação das Aplicações Paralelas

As estruturas de dados utilizadas nos métodos numéricos aplicados podem ser classificadas de acordo com a comunicação necessária entre partes distintas da estrutura do código durante a computação. Dessa forma, alguns pesquisadores fazem a classificação conforme a Tabela 2, para as aplicações em que o padrão de comunicação é estático durante a computação, ou seja, mesmo para problemas dinâmicos a estrutura de dados é fixa. Dessa forma, a comunicação explícita é aquela relacionada com a troca de informações entre partes vizinhas da estrutura de dados. A comunicação implícita é caracterizada pela transmissão de dados entre qualquer parte da estrutura global, o que faz com que as implementações paralelas dessas aplicações se tornem mais difíceis.

As comunicações estruturadas são aquelas em que o padrão de transmissão das informações pode ser estabelecido por uma lei de formação. Ao contrário, as

comunicações não-estruturadas são aquelas em que o padrão de troca de dados não segue nenhuma regra, sendo distinta para cada parte da estrutura.

<b>Classificação de Acordo com o Padrão Estático de Comunicação dos Dados</b>		
<b>Pouca ou Nenhuma Comunicação</b>	Embaraçosamente Paralela (EP)	
	<b>Comunicação Estruturada</b>	<b>Comunicação Não Estruturada</b>
<b>Comunicação Explícita (Vizinhos)</b>	Comunicação Estática Explícita Estruturada (EEE)	Comunicação Estática Explícita Não Estruturada (EENE)
<b>Comunicação Implícita (Global)</b>	Comunicação Estática Implícita Estruturada (EIE)	Comunicação Estática Implícita Não Estruturada (EINE)

Tabela 2 - Classificação das aplicações com padrão de comunicação estático.

Para as aplicações com padrão dinâmico de comunicação, nas quais a estrutura de dados varia arbitrariamente durante a computação, a classificação é dada pela Tabela 3. As implementações paralelas frequentemente utilizam alguma técnica para otimizar a comunicação de informações, através da reorganização da estrutura de dados como, por exemplo, a renumeração de malhas. Nas aplicações com padrão dinâmico de comunicação, esses artifícios se tornam bastante caros, uma vez que esse procedimento terá que ser executado várias vezes durante a computação.

<b>Classificação de acordo com o Padrão Dinâmico de Comunicação dos Dados</b>		
<b>Pouca ou Nenhuma Comunicação</b>	Embaraçosamente Paralela (EP)	
	<b>Comunicação Estruturada</b>	<b>Comunicação Não Estruturada</b>
<b>Comunicação Explícita (Vizinhos)</b>	Comunicação Dinâmica Explícita Estruturada (DEE)	Comunicação Dinâmica Explícita Não Estruturada (DENE)
<b>Comunicação Implícita (Global)</b>	Comunicação Dinâmica Implícita Estruturada (DIE)	Comunicação Dinâmica Implícita Não Estruturada (DINE)

Tabela 3 - Classificação das aplicações com padrão de comunicação dinâmico.

Além de serem enquadrados na classificação mencionada, os métodos numéricos aplicados podem ser organizados de acordo com a dificuldade da implementação paralela, como mostra a Tabela 4.

Podemos observar que aplicações da classe EP, tal como o Método de Monte Carlo que tem pouca comunicação de dados, têm grande facilidade para implementação paralela. Em outros casos, como Método Diferenças Finitas (MDF), Método Volumes Finitos (MVF) e Método dos Elementos Finitos (MEF), podem ter grau de dificuldade variável dependendo do tipo de aplicação.

Os métodos baseados em partículas tais como o Método das Partículas Hidrodinâmicas (SPH) e Método dos Elementos Discretos (MED), podem também variar o grau de dificuldade, mas sem dúvida são os mais difíceis, dadas as características dos problemas tratados através desses métodos. Para exemplificar podemos citar os problemas de impacto com fragmentação e análise de fluxo granular, onde a vizinhança das partículas muda arbitrariamente durante a análise. Nesses casos, que em geral pertencem à classe (DINE), há técnicas que permitem transformá-los em

problemas da classe (DENE), através da decomposição do domínio em subdomínios e uma reorganização dos dados (renumeração).

<b>Classificação das Aplicações de acordo com Dificuldade de Implementação Paralela</b>		
<b>Aplicações</b>	<b>Métodos Numéricos Aplicados</b>	<b>Dificuldade de Implementação</b>
<b>(EP)</b>	Método Monte-Carlo.	<p>Fácil</p> <p>↓</p> <p>Moderado</p> <p>↓</p> <p>Difícil</p>
<b>(EEE)</b>	Método Diferenças Finitas (MDF) e Método Volumes Finitos (MVF).	
<b>(EENE)</b>	Método dos Elementos Finitos, MVF e Método das Partículas Hidrodinâmicas com vizinhança fixa.	
<b>(EIE)</b>	MDF, MVF	
<b>(EINE)</b>	MEF, MVF e SPH com vizinhança fixa em Simulação da Dinâmica Molecular e Astrofísica.	
<b>(DEE)</b>	MDF, MVF.	
<b>(DENE)</b>	Método dos Elementos Discretos e SPH com vizinhança variável, em Simulações de Problemas quase estáticos.	
<b>(DIE)</b>	MDF, MVF.	
<b>(DINE)</b>	MEF, MVF e (MED, SPH para problemas mais gerais de Simulação da Dinâmica Molecular, Astrofísica e Impacto de alta energia).	

Tabela 4 - Classificação de acordo com a dificuldade da implementação paralela.

Entretanto, existe a necessidade de se avaliar o impacto computacional que a execução das técnicas de decomposição e reorganização do domínio terão sobre o desempenho do código implementado. Além disso, as regiões de interface entre os subdomínios exigem um tratamento adequado de sincronização e equilíbrio da carga computacional de cada subdomínio.

Tendo em vista o que foi exposto nesta seção e considerando escassez de detalhes sobre implementações do MED na literatura, procurou-se nesse trabalho adaptar algumas técnicas utilizadas em dinâmica molecular [3], juntamente com exploração de alguns aspectos da estrutura de dados proposta por CUNDALL[18], para o desenvolvimento do código, conforme será explicitado nas seções seguintes.

### **3.2 Etapas da Modelagem**

A modelagem através do MED compreende três etapas, conhecidas classicamente como:

- Etapa de Pré-processamento - Nesta fase o modelo é gerado com todas as características físicas e geométricas, sendo preparado para a etapa de processamento.
- Etapa de Processamento - Nesta fase o modelo gerado na etapa anterior é submetido a uma seqüência de computação onde são aplicadas todas solicitações que lhe foram impostas. Assim são processadas todas as informações que serão preparadas para interpretação na etapa seguinte.
- Etapa de Pós-processamento - Nesta fase as informações geradas na etapa de processamento são preparadas para interpretação e análise dos resultados através de visualizações gráficas.

Neste trabalho foram implementadas as etapas de Pré-processamento e de Processamento. Para a etapa de Pós-processamento da modelagem utilizou-se o programa comercial Ensignt versão 7.6.

### **3.3 Pré-processamento - Geração de Modelo**

Os problemas modelados através do MED, de modo geral, têm a característica de serem constituídos por partículas de vários tamanhos e dispostas no modelo de alguma forma. A distribuição uniforme das propriedades físicas e geométricas é utilizada na maior parte dos modelos. Assim o primeiro problema nessa modelagem é estabelecer um conjunto de partículas dispostas de tal forma que se tenha uma representatividade adequada para o material que está sendo utilizado no modelo.

Nos Estados Unidos, o Sandia National Laboratories (SNL) [59], que vem trabalhando em pesquisas com MED no estudo de diversos problemas, utiliza uma técnica que permite, de maneira eficiente, gerar modelos de elementos discretos com grande número de partículas e com variadas distribuições de formas, tamanhos e propriedades físicas. Esta técnica consiste basicamente em se tomar algumas partículas representativas de uma dada distribuição de propriedades físicas e geométricas, e em seguida submeter este conjunto à ação da gravidade para remoção dos espaços vazios, posteriormente o aglomerado de partículas que se formou é copiado para originar um sistema maior e então novamente submetendo-o a ação da gravidade, de modo que se obtenha um certo grau de compactação.

A implementação do código para geração do modelo utiliza a técnica descrita anteriormente, onde os dados iniciais são os raios máximo e mínimo, o número de elementos no conjunto primário, o número de materiais e a quantidade de cópias. A Figura 3.1 ilustra um exemplo da geração de um pequeno modelo 2D constituído de elementos esféricos com diâmetros e materiais diferentes.

A técnica de geração adotada é interessante, porque as cópias sucessivas, ao mesmo tempo em que permitem a distribuição homogênea das características do sistema também minimizam o tempo de processamento para obtenção do modelo, já que o conjunto primário de elementos é previamente estabilizado.

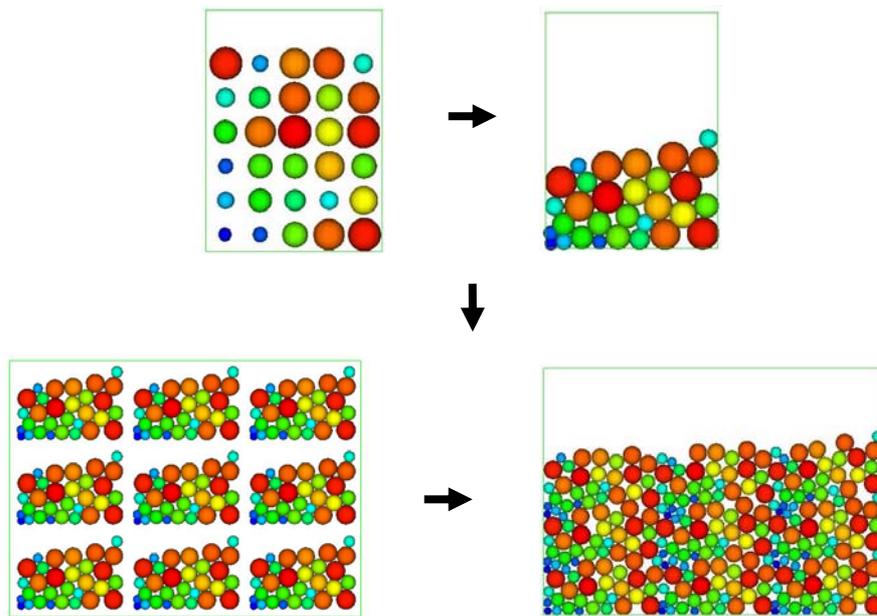


Figura 3.1 - Geração do modelo de elemento discreto.

A implementação contempla apenas a geração de modelos em forma de paralelepípedo, em razão da estrutura do algoritmo de geração ser baseada nas direções cartesianas. Entretanto, é possível a obtenção de outras geometrias a partir de um modelo em forma de paralelepípedo, através da manipulação das superfícies do contorno.

A Figura 3.2 apresenta a primeira etapa de geração de um modelo 3D, com a formação pseudo-aleatória do conjunto primário de elementos, a partir do intervalo de variação para as coordenadas, raios e materiais estabelecidos inicialmente.

A segunda etapa de geração do modelo 3D, através das cópias do conjunto primário, e estabilização do modelo final são mostrados na Figura 3.3. Para produzir modelos com níveis de compactação iniciais maior que proporcionada pela ação da gravidade, procede-se um movimento de contração das superfícies do contorno.

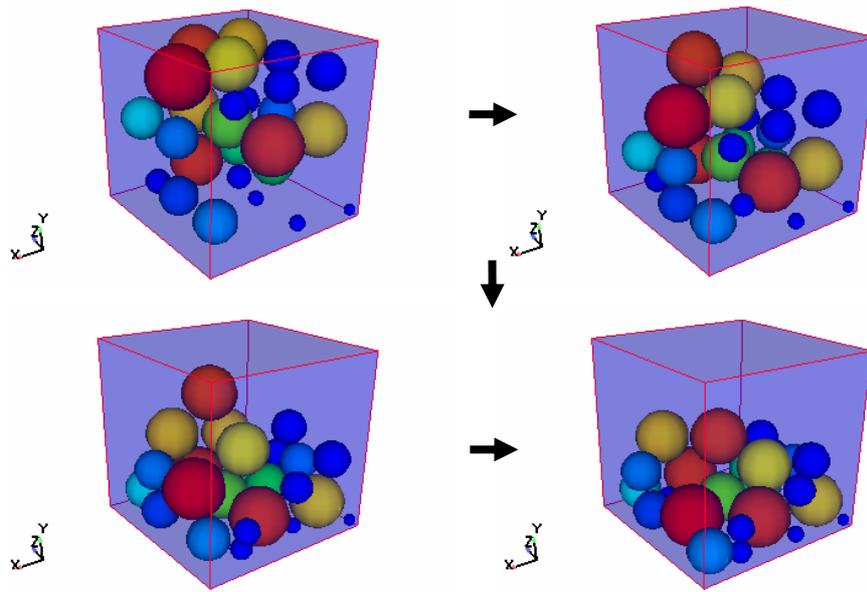


Figura 3.2 - Geração pseudo aleatória do conjunto primário de elementos.

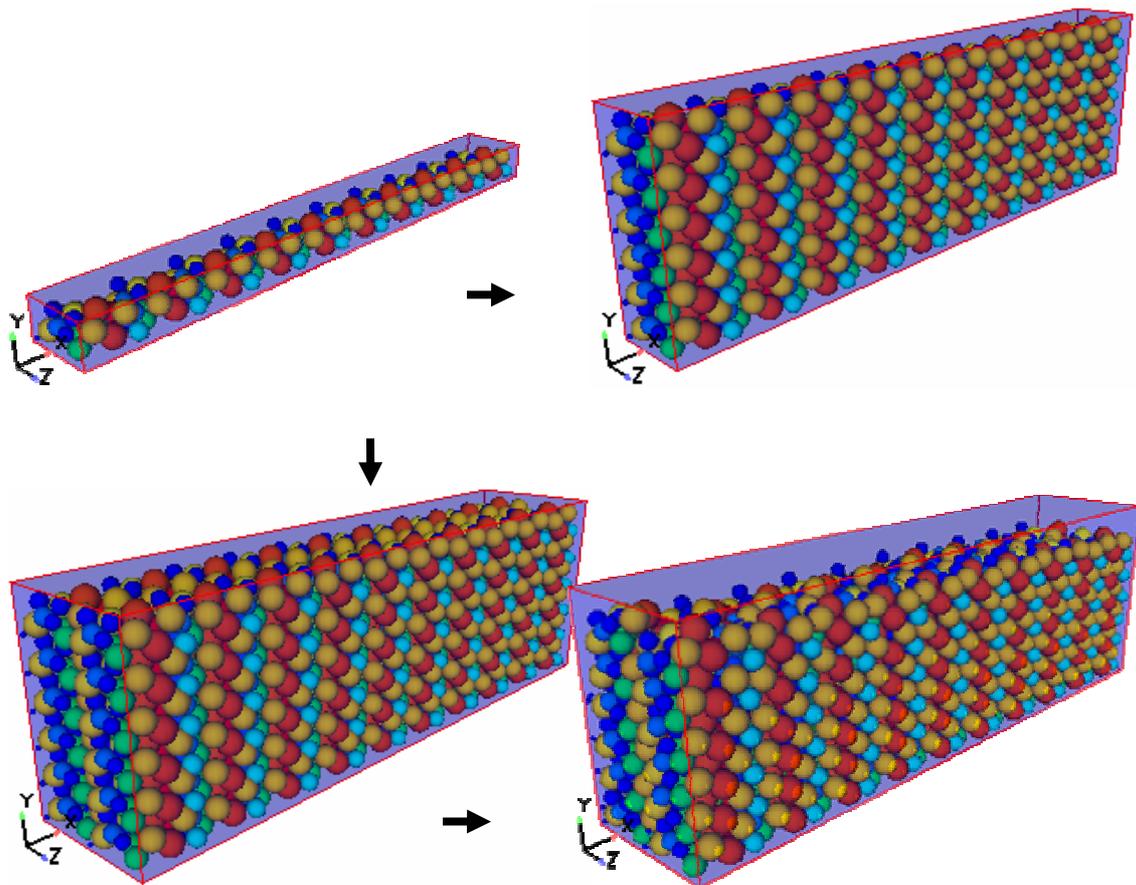


Figura 3.3 - Cópias do conjunto primário de elementos e obtenção do modelo final.

### 3.4 Processamento - Ciclo Computacional

O ciclo básico de cálculo consiste numa pesquisa dos pares de elementos em contato e dos contatos com parede, onde são computadas as interpenetrações nos contatos. Em seguida faz-se a aplicação da lei de força-deslocamento para atualização das forças e torques atuantes e a integração das equações de movimento para cada elemento do sistema conforme o esquema da Figura 3.4. A cada passo de tempo são obtidas as coordenadas e as grandezas cinemáticas de translação e rotação dos elementos.

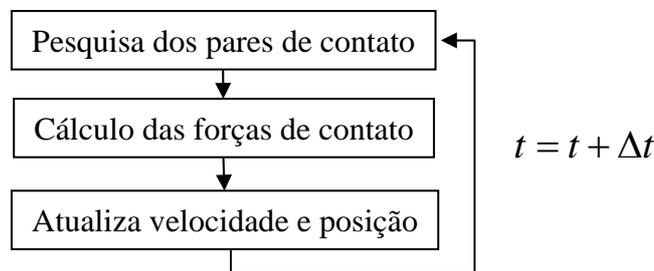


Figura 3.4 - Ciclo de cálculo.

### 3.5 Pesquisa dos Pares de Contato

Uma parte de extrema importância, em termos de tempo de processamento e desempenho computacional na implementação do MED, é a pesquisa dos pares de elementos em contato. A forma mais direta de se fazer esta pesquisa é através do algoritmo Força Bruta ilustrado na Figura 3.5, onde NCONT é número de pares de elementos em contato e LISTA é um arranjo que armazena o número dos elementos que formam o par de contato. Como pode ser observado, o tempo de processamento para execução deste algoritmo é de ordem quadrática  $O(N^2)$ , onde  $N$  é o número de elementos do modelo. Com este custo computacional para realização da pesquisa, análises de grande porte se tornam inviáveis.

1. Faça de I=1 até Número de elementos
2.       Faça de J=1 até Número de elementos
3.             Calcula a distância entre os elementos I e J
4.             Verifica se estes elementos estão em contato
5.             Se os elementos estão em contato faça
6.                  $NCONT = NCONT + 1$
7.                  $LISTA(NCONT,1) = I$
8.                  $LISTA(NCONT,2) = J$
9.             Fim se
10.       Fim da iteração em J
11. Fim da iteração em I

Figura 3.5 - Algoritmo Força Bruta.

Para minimizar o custo computacional da pesquisa dos pares de elementos em contato, foi utilizado o Método das Células Indexadas, proposto no trabalho de QUENTREC e BROT [55], na construção da lista de pares. Nesse Método, o domínio é dividido em células como ilustra a Figura 3.6, e então se realiza a busca somente entre os elementos que estão contidos na mesma célula e nas suas vizinhas.

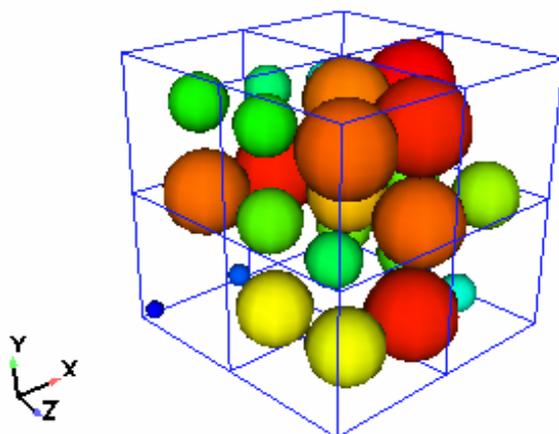


Figura 3.6 – Domínio 3D dividido em células.

Além disso, a busca nas células é realizada de forma que um par em contato é encontrado uma única vez, para isso, o percurso de busca em cada célula e entre células vizinhas é realizado conforme sugere ALLEN E TILDESLEY [3].

Essa técnica reduz o tempo de processamento da pesquisa de contatos para ordem linear  $O(N)$ . QUARANTA [54] fez um estudo da eficiência do algoritmo de células comparando-o com um algoritmo padrão, utilizando uma CPU com processamento vetorial do CRAY J90 do NACAD\COPPE\UFRJ. Nesse trabalho, a variação do número de células utilizadas na divisão do domínio mostrou que uma maximização desse número conduz a melhor eficiência do algoritmo. Por outro lado, existe um limite ao qual o número de células não pode exceder, porque dois elementos quaisquer em contato devem estar dentro de uma mesma célula ou de suas vizinhas para que esse par seja encontrado. Esta restrição implica num tamanho mínimo para as células dado por,

$$L_{cel} \geq 2R_{\max} \quad (3.1)$$

onde  $L_{cel}$  é o tamanho ótimo das células e  $R_{\max}$  é maior raio entre os elementos do modelo. Segundo este critério, o número de células em cada direção cartesiana pode ser calculado como,

$$N_x = \text{int} \left( \frac{X_{\max} - X_{\min}}{2R_{\max}} \right) \quad (3.2)$$

$$N_y = \text{int} \left( \frac{Y_{\max} - Y_{\min}}{2R_{\max}} \right) \quad (3.3)$$

$$N_z = \text{int} \left( \frac{Z_{\max} - Z_{\min}}{2R_{\max}} \right) \quad (3.4)$$

onde int é a função que retorna a parte inteira das frações, e as coordenadas dos pontos extremos do domínio são tomadas conforme ilustra a Figura 3.7 em duas dimensões.

A estratégia de implementação é utilizar esse algoritmo de forma otimizada, de modo a conseguir maior eficiência na sua execução em computadores de processamento vetorial. Para isso, além de maximizar o número de células, com uma atualização dinâmica durante a computação, é necessário eliminar as possibilidades de recorrência de dados entre as células que se pretende efetuar cálculos em modo vetorial. Com a

estrutura de dados organizada por células, existem formas de se eliminar a recorrência de dados de modo bastante natural. Visto que as células representam uma decomposição do domínio permitindo que alguns cálculos sejam efetuados simultaneamente.

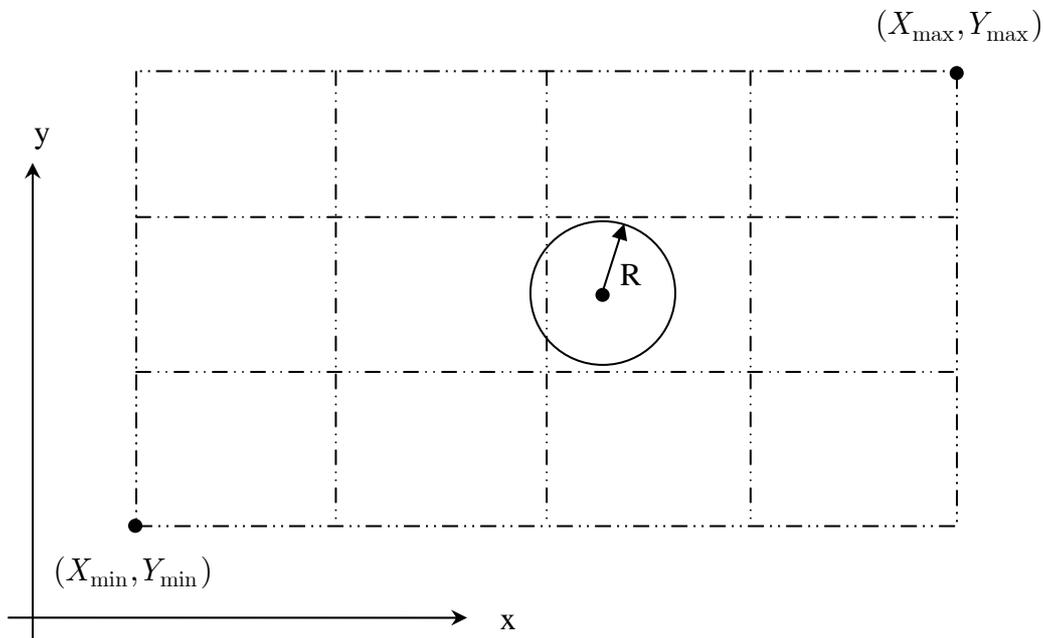


Figura 3.7 - Representação de células numa região retangular.

### 3.5.1 Construção da Estrutura de Dados por Células

A estrutura de dados por células é uma lista encadeada. Conforme é descrito em [3], a primeira parte deste método envolve a organização dos elementos dentro de cada célula. Esta etapa é executada rapidamente e pode ser necessário repeti-la em todos os passos de tempo, pois os elementos se movimentam e mudam de célula arbitrariamente.

Esta organização é realizada originando dois arranjos de dados, chamados pelos autores do Método de HEAD e LIST. A dimensão do arranjo HEAD é dada pelo número de células. O arranjo LIST é uma lista encadeada, com dimensão igual ao número de elementos. Cada posição do arranjo HEAD corresponde a uma célula, onde é armazenado o número que identifica o primeiro elemento contido na mesma. Este número é a posição no arranjo LIST onde se encontra o endereço nesta lista do segundo elemento daquela célula. Deste modo, a posição do segundo elemento no arranjo LIST

armazena o endereço nesta lista do terceiro elemento daquela célula, e assim sucessivamente.

Com o procedimento anterior, o arranjo LIST é percorrido até que se encontre o último elemento daquela célula, e a posição deste elemento no arranjo LIST armazena o valor zero, indicando que não há mais elementos na mesma. Para ilustrar este procedimento a Figura 3.8 mostra um exemplo com duas células bidimensionais e a Figura 3.9 apresenta a construção da lista encadeada com a configuração dos arranjos HEAD e LIST para este exemplo.

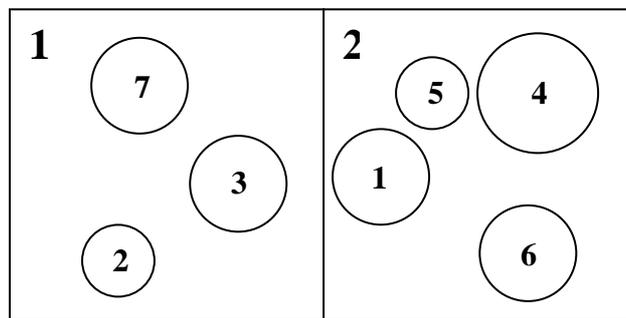


Figura 3.8 - Exemplo com duas células bidimensionais e sete elementos.

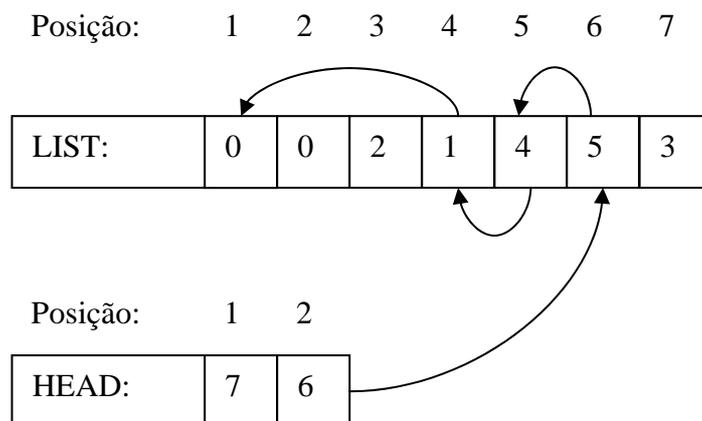


Figura 3.9 - Construção das listas encadeadas para duas células 2D.

A construção do arranjo HEAD e LIST é bastante simples, como mostra a rotina da Figura 3.10 para o caso de células tridimensionais. O baixo custo deste procedimento associado ao requerimento mínimo de memória, contribui para o bom desempenho do algoritmo.

```
1. Faça de I=1 até Número de células
2.     HEAD(I) = 0
3. Fim da iteração em I
4.
5. Faça de I = 1, NEL
6.     X = XYZ(I,1)
7.     Y = XYZ(I,2)
8.     Z = XYZ(I,3)
9.     IX = NCX * ( X - XMIN ) / ( XMAX - XMIN ) + 1
10.    IY = NCY * ( Y - YMIN ) / ( YMAX - YMIN ) + 1
11.    IZ = NCZ * ( Z - ZMIN ) / ( ZMAX - ZMIN ) + 1
12.    ICELL = ( IZ - 1 ) * NCX * NCY + ( IY - 1 ) * NCX + IX
13.    HEAD (I) = IPCELLIST (ICELL)
14.    LIST(ICELL) = I
15. Fim da iteração em I
```

Figura 3.10 - Rotina para obtenção dos arranjos HEAD e LIST.

Na figura acima, XYZ é o arranjo de coordenadas dos elementos, NCX, NCY e NCZ são respectivamente o número de células nas direções X, Y e Z, e o limite do modelo em cada direção desta é dado por, XMIN e XMAX; YMIN e YMAX ; ZMIN e ZMAX.

A pesquisa dos pares de elementos em contato feita com a utilização desta estrutura de dados é realizada percorrendo-se todas as células. Primeiramente para cada célula verifica-se a existência do contato do primeiro elemento contra todos os outros, seguindo os endereços na lista encadeada. E em seguida do segundo contra os próximos da lista, que naturalmente começa a partir do terceiro elemento e assim sucessivamente.

A pesquisa feita dessa forma evita a contagem dupla da iteração do elemento “i” com o elemento “j”. Além disso, os pares de elementos da lista de contato encontrados a cada iteração, são completamente independentes, isto implica que não há dependência de

dados para esse trecho do vetor de força de contato, fazendo com que se possa executá-lo em modo vetorial e paralelo.

O elemento de uma determinada célula, pode ainda participar de um contato com outro elemento de uma célula vizinha. Neste caso, para se evitar a duplicidade da iteração  $ij$ , realiza-se a busca somente dos elementos de uma determinada célula contra os elementos de apenas uma parte das células vizinhas. Para ilustrar como isto pode ser feito, a Figura 3.11 mostra o esquema de busca entre as células vizinhas para um caso bidimensional. De forma análoga, este esquema pode ser estendido para o caso de células 3D.

<b>13</b>	<b>14</b>	<b>15</b>	<b>16</b>
<b>9</b>	<b>10</b>	<b>11</b>	<b>12</b>
<b>5</b>	<b>6</b>	<b>7</b>	<b>8</b>
<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>

Figura 3.11 - Esquema de busca entre células vizinhas.

As células bidimensionais que não estejam nas extremidades possuem oito células vizinhas, entretanto a busca é realizada somente em quatro delas. A Figura 3.11 apresenta a iteração na célula 6, onde é realizada a busca contra as suas vizinhas 3, 7, 11 e 10. Os eventuais contatos relacionados com as outras células vizinhas serão encontrados na iteração referente à estas, ou seja quando o foco for uma delas.

A característica de independência dos dados entre células por iteração, fica ainda mais evidente neste caso. Mas é necessário observar que isso se verifica apenas se durante a iteração nas células a busca contra as vizinhas segue a seqüência correspondente em

todas as células. Considerando o exemplo da Figura 3.11, seriam calculadas simultaneamente as interações que envolvem os pares, 1-5; 2-6; 3-7 e assim por diante. Na iteração seguinte consideram-se as células vizinhas em outra direção, isto é, calculam-se simultaneamente as interações que envolvem os pares, 1-6; 2-7; 3-8 e assim sucessivamente. Com esta estratégia de implementação, foi possível atingir um bom nível de vetorização e paralelização do código.

# Capítulo 4

## Exemplos Numéricos

Neste capítulo, serão apresentados alguns exemplos de aplicação do método. O primeiro representa a classe de problemas que envolvem os mecanismos de deformação e fratura, em eventos de contato e impacto. No segundo, será ilustrada a aplicabilidade do método em análise de fluxo granular. O terceiro exemplo, trata de aplicação para análise do processo de produção de areia, uma perspectiva que vem se destacando no estudo desse importante problema para a indústria do petróleo. No quarto exemplo, estuda-se o fenômeno de segregação granular conhecido como ‘efeito castanha-do-pará’, ilustrando a aplicação do método a esta classe de problema. Finalmente, no último exemplo trata-se da simulação de um ensaio físico, que estuda o comportamento do meio granular submetido à vibrações harmônicas.

### 4.1 Considerações Iniciais

Várias calibrações numéricas são necessárias para avaliar os parâmetros físicos que devem ser utilizados na simulação. Nos exemplos do presente trabalho, os parâmetros micro-mecânicos foram adotados de acordo com dados freqüentemente encontrados na literatura, apenas com intuito de mostrar o potencial de aplicação do método, e nortear estudos futuros.

A medição de forma direta dos parâmetros micro-mecânicos é extremamente complicada para a maioria dos materiais, tendo sido realizada somente para validações de modelos teóricos, utilizando materiais fotossensíveis [32]. Tendo em vista esta dificuldade, os parâmetros micro-mecânicos são ajustados através de experimentos

numéricos, com o objetivo de gerar um modelo de elementos discretos, que apresente o comportamento mecânico, do ponto de vista macroscópico, do material que se deseja simular.

Como foi exposto, um programa de modelagem através do Método dos Elementos Discretos é durante o processo da geração de um modelo para análise, um laboratório numérico para desenvolvimento de materiais, onde a combinação de vários parâmetros micro-mecânicos dará origem a um novo material, cujas características são avaliadas através de diversos ensaios numéricos.

As propriedades físicas dos materiais, medidas em escala macroscópica, mais utilizadas na engenharia para caracterização do seu comportamento mecânico são:

- Módulo de deformação volumétrica.
- Módulo de Elasticidade.
- Coeficiente de Poisson.
- Resistência à Compressão.
- Resistência à Tração.
- Resistência ao cisalhamento.
- Coesão.
- Ângulo de atrito.
- Densidade.
- Densidade aparente.
- Curva tensão deformação.
- Curva de adensamento.

Dentre o conjunto de parâmetros para caracterização dos materiais, as propriedades mecânicas citadas acima podem ser utilizadas para avaliação dos parâmetros para análise através do Método dos Elementos Discretos. Alguns trabalhos [31],[46] encontrados na literatura discutem técnicas para avaliação dos parâmetros de simulação para o MED.

## 4.2 Simulação de Impacto

Um exemplo numérico que simula o impacto entre dois blocos é mostrado na Figura 4.1., onde o Bloco B2 se move com velocidade inicial  $v_0$  em direção ao Bloco B1 estacionado. Essa simulação contempla os efeitos de grandes deformações e o processo de fragmentação. As dimensões e propriedades físicas dos materiais estão resumidas na Tabela 5 e na Tabela 6.

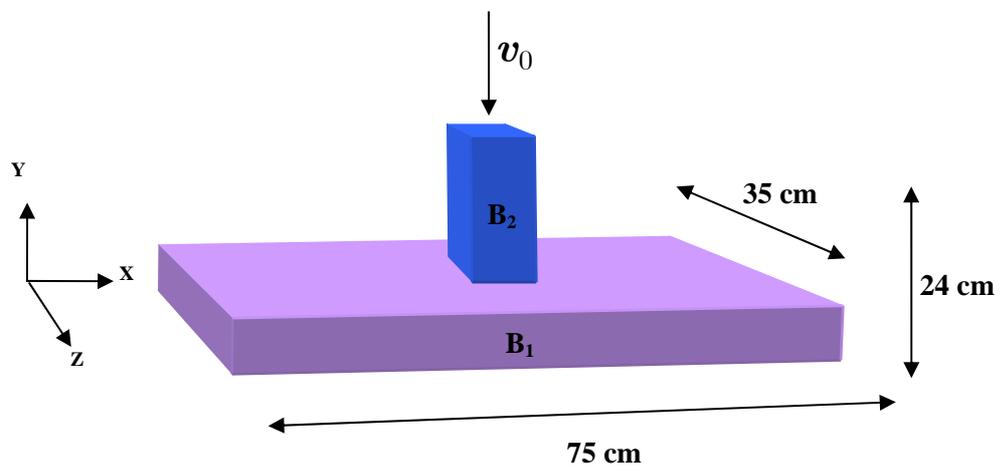


Figura 4.1 - Modelo esquemático da simulação do impacto entre os blocos B<sub>1</sub> e B<sub>2</sub>.

Simulação de Impacto entre Blocos		
Propriedades Físicas	Valor	
	Bloco B <sub>1</sub>	Bloco B <sub>2</sub>
Módulo elástico normal $k^n$ (N/m)	$64 \times 10^3$	$640 \times 10^3$
Módulo elástico tangencial $k^t$ (N/m)	$9.6 \times 10^3$	$96 \times 10^3$
Ângulo de atrito $\phi$ (graus)	26.5°	26.5°
Força de coesão (N)	0.96	9.6
Massa específica $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	2500	5000
Coefficiente de restituição normal $\eta^n$	0.01	0.01
Coefficiente de restituição tangencial $\eta^t$	0.01	0.01
Força de tração máxima $F$ (N)	0.96	9.6
Parâmetro $\varepsilon$ da curva de $f^n$	0.5	0.5

Tabela 5 - Parâmetros micro-mecânicos - Simulação de Impacto.

Simulação de Impacto Entre Blocos		
Propriedades Geométricas	Bloco B <sub>2</sub>	Bloco B <sub>1</sub>
Diâmetro máximo (m)	0.010	0.018
Diâmetro mínimo (m)	0.010	0.010
Número de elementos	1280	9594

Tabela 6 - Dados do modelo da Simulação de Impacto.

A Figura 4.2 apresenta o campo transiente de velocidade e a forma deformada, para uma velocidade de impacto  $v_0 = 5$  m/s. A vista em perspectiva é mostrada para quatro instantes de simulação, onde se observa a perfuração do Bloco B<sub>1</sub> e uma significativa deterioração do Bloco B<sub>2</sub>.

A vista em corte é mostrada na Figura 4.3, onde se observa com mais detalhe o que ocorre no plano médio da perfuração do Bloco B<sub>1</sub>. Na Tabela 7 são apresentadas a plataforma computacional utilizada e o tempo de processamento da análise.

Análise executada em PC com processador Pentium 4 ( 2.40 GHz – 1 GB de RAM )			
Passo de tempo	Número de passos de tempo	Tempo de CPU	Tempo de simulação
$6.43 \times 10^{-6}$ s	20,000	50 min	0.128 s

Tabela 7 - Tempo de processamento.

Neste exemplo observamos a potencialidade de aplicação do método ao problema de impacto. É importante observar que a discretização de todo o domínio utilizando partículas, tem um custo computacional elevado. Neste caso podemos notar, que a combinação com outros métodos para o tratamento das regiões do domínio com taxas de deformação menores pode melhorar o desempenho da análise.

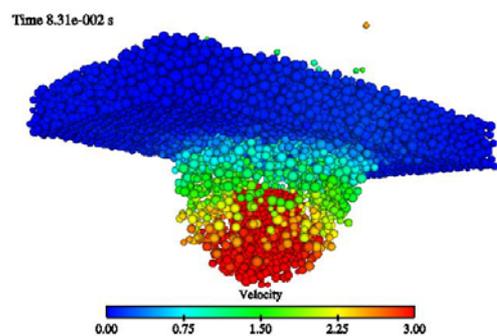
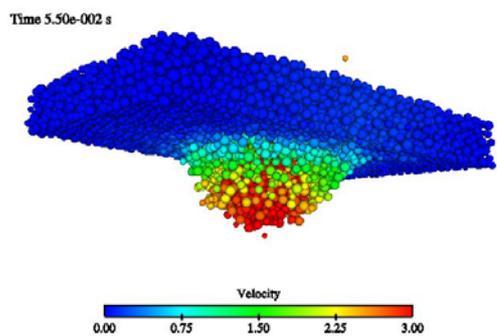
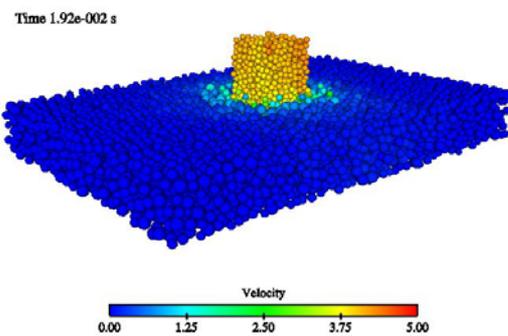
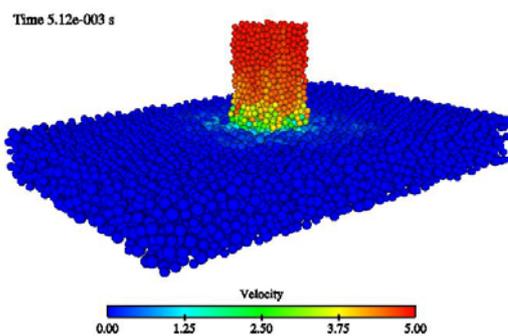


Figura 4.2 - Campo de velocidade e forma deformada vista em perspectiva.

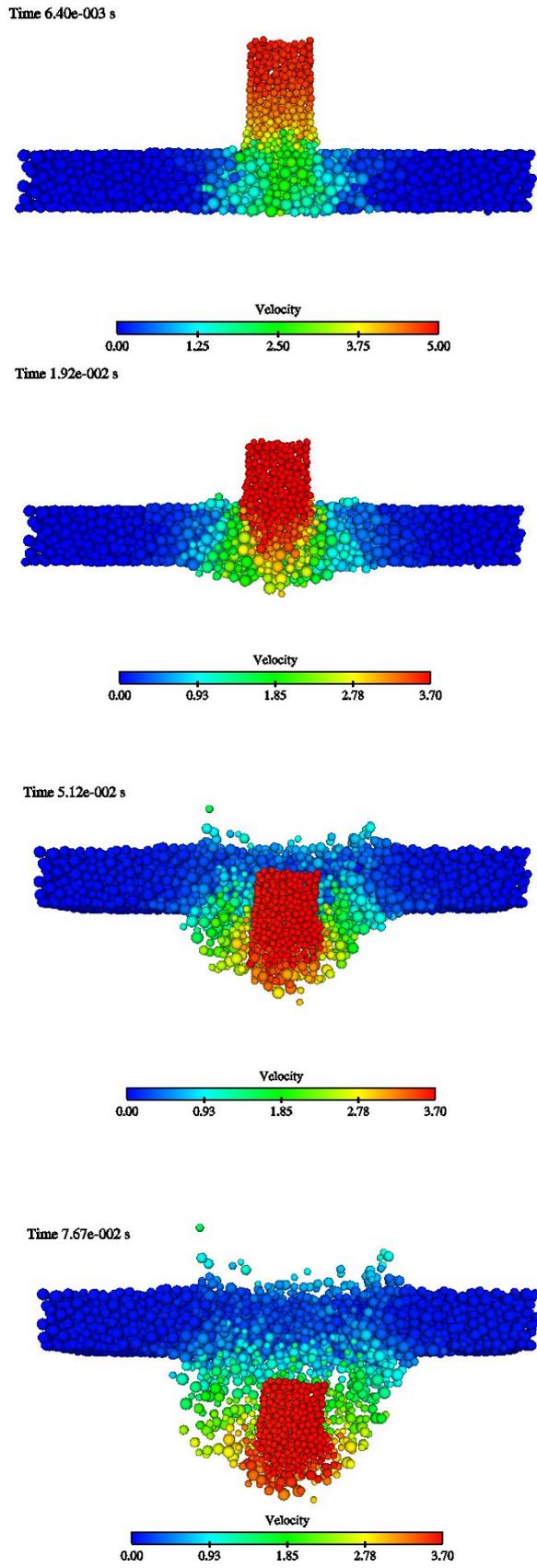


Figura 4.3 - Campo de velocidade e forma deformada vista em corte.

### 4.3 Simulação de Fluxo Granular

Aplicações que envolvem o transporte de grãos e seus efeitos sobre equipamentos industriais têm sido estudadas [50] com a utilização do método dos elementos discretos. Este exemplo numérico simula o fluxo granular desenvolvido pela rotação de um cilindro provido de rampas helicoidais conforme a configuração inicial apresentada na Figura 4.5. Esta aplicação tem como objetivo avaliar a versatilidade na modelagem tridimensional das diversas formas de equipamentos que possam estar interagindo no sistema granular. Por simplicidade foram consideradas as mesmas propriedades físicas de contato para todos os elementos do modelo. Entretanto, podem ser utilizadas propriedades físicas diferentes tanto para as partículas como para as paredes. Os parâmetros físicos adotados estão resumidos na Tabela 8 e Tabela 9.

A geometria do cilindro é formada por uma malha de quadriláteros como no detalhe da Figura 4.4. Este cilindro é colocado no interior de uma caixa contendo partículas não adesivas. Em seguida inicia-se uma rotação do cilindro ao redor de seu próprio eixo, estabelecendo, desta forma, um fluxo ascendente através do movimento da rampa helicoidal. A visualização do fluxo de partículas é apresentada na Figura 4.6.

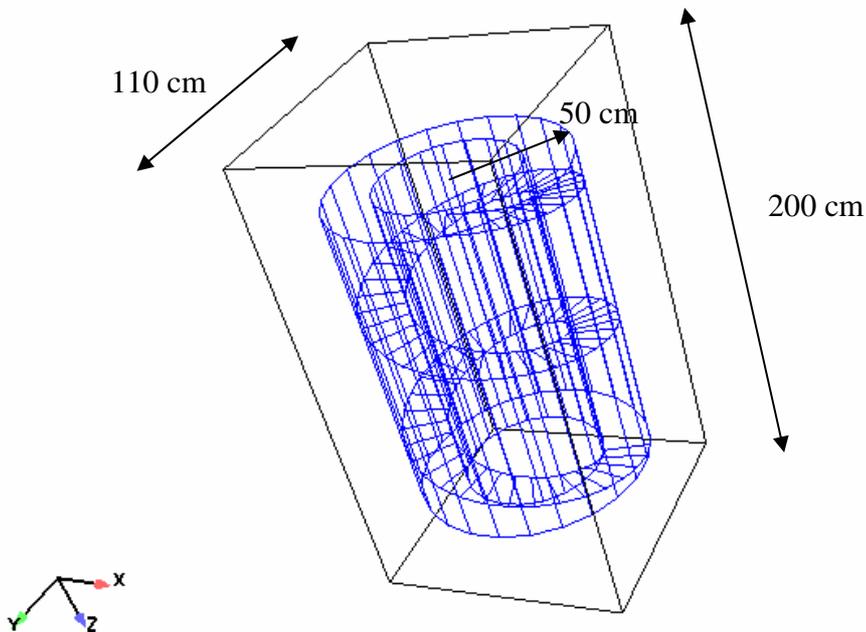


Figura 4.4 - Geometria do cilindro.

Simulação de Fluxo Granular	
Propriedades Físicas	Valor
Módulo elástico normal $k^n$ (N/m)	$5 \times 10^7$
Módulo elástico tangencial $k^t$ (N/m)	$5 \times 10^6$
Ângulo de atrito $\phi$ (graus)	$16^\circ$
Força de coesão (N)	0
Massa específica $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	$3.5 \times 10^3$
Coefficiente de restituição normal $\eta^n$	0.01
Coefficiente de restituição tangencial $\eta^t$	0.01
Força de tração máxima $F$ (N)	0
Parâmetro $\varepsilon$ da curva de $f^n$	0.01

Tabela 8 - Parâmetros micro-mecânicos para a Simulação de Fluxo Granular.

Simulação de Fluxo Granular	
Propriedades Geométricas	
Diâmetro máximo (m)	0.04
Diâmetro mínimo (m)	0.02
Número de elementos	28800

Tabela 9 - Dados do modelo da Simulação de Fluxo Granular.

### Configuração Inicial

95 rotações por minuto

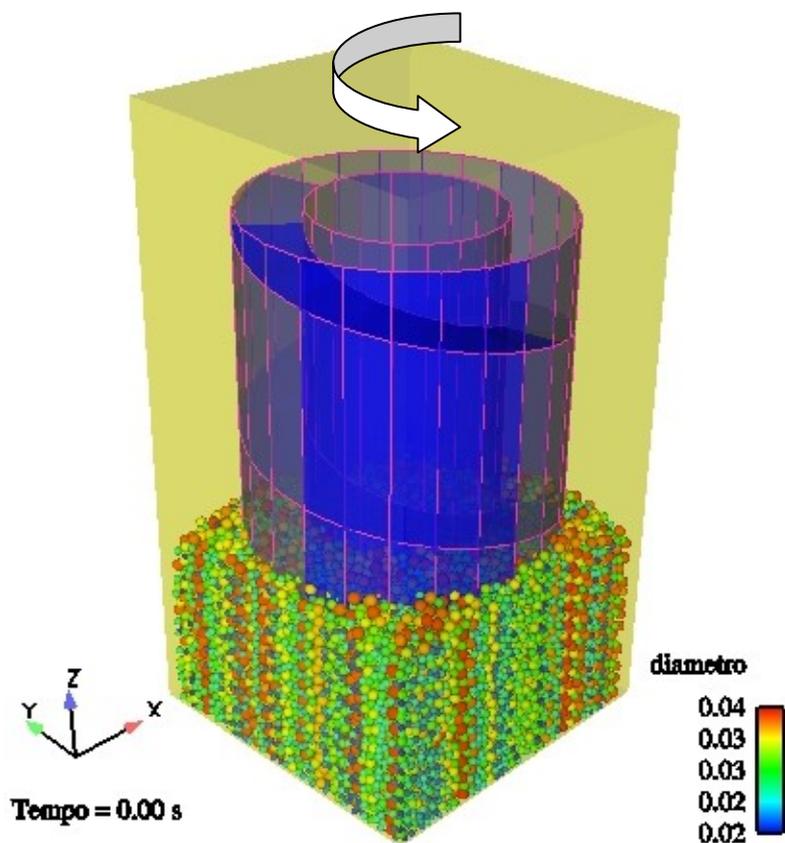


Figura 4.5 - Simulação de fluxo granular em cilindro com rampa helicoidal.

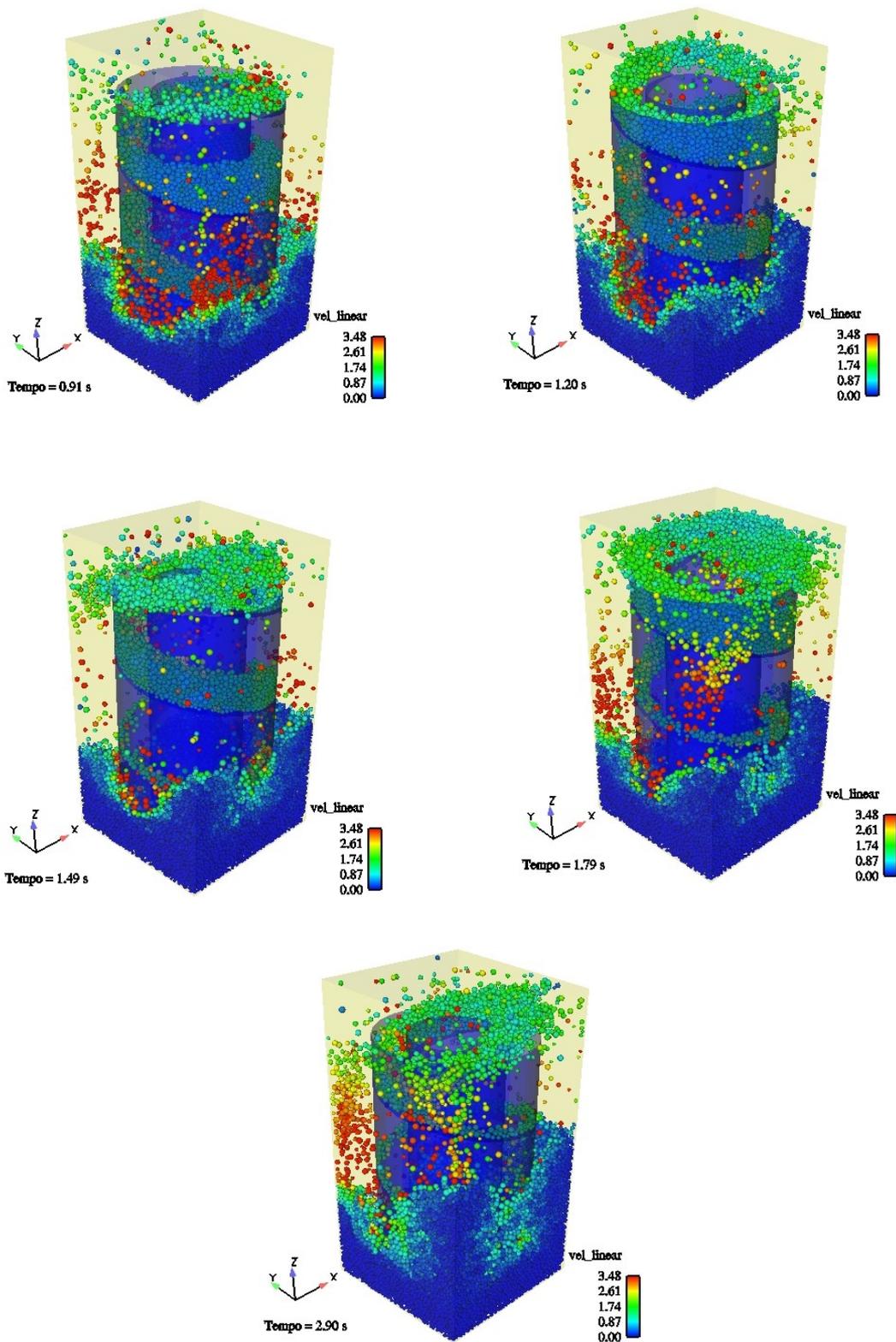


Figura 4.6 - Resultados da simulação de fluxo granular em cilindro helicoidal.

Na Tabela 10 são apresentadas a plataforma computacional utilizada na execução da simulação e o tempo de processamento da análise.

Análise executada no CRAY SV1 NACAD/COPPE/UFRJ			
Passo de tempo	Número de passos de tempo	Tempo de CPU	Tempo de simulação
$3.7 \times 10^{-6}$ s	800,000	58 h	2.9 s

Tabela 10 - Tempo total de processamento

Para análise do desempenho do código, executou-se para este exemplo 1000 passos de tempo no CRAY SV1 do NACAD/COPPE/UFRJ e no CRAY T94 do CESUP/UFRGS. Alguns resultados referentes ao desempenho do código estão resumidos na Tabela 11. A distribuição de carga computacional dada pelo CRAY SV1 é apresentada na Figura 4.7, e para o CRAY T94 na Figura 4.8.

Resultados para 1000 passos de tempo de análise	CRAY SV1	CRAY T94
Desempenho global (Mflops)	167.4	431.8
Rotina de busca de contatos (Mflops)	180.7	611.0
Rotina de atualização do vetor de força (Mflops)	214.8	411.3
Tempo de processamento (s)	407	174
Memória utilizada (MWords)	5.75	5.75

Tabela 11 - Resumo dos dados de desempenho do código.

### Distribuição de Carga Computacional

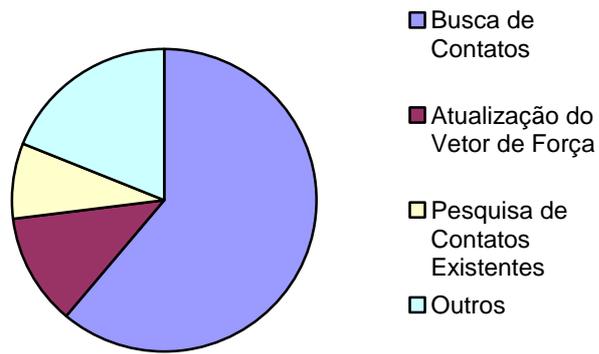


Figura 4.7 - Distribuição de carga computacional Cray SV1.

### Distribuição de Carga Computacional

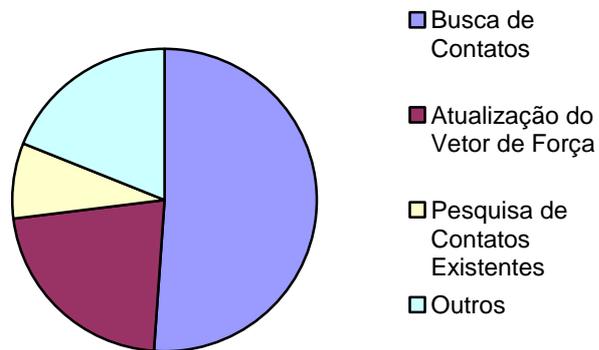


Figura 4.8 - Distribuição de carga computacional Cray T94.

## 4.4 Simulação do Processo de Produção de Areia em Poços de Petróleo.

Neste exemplo, buscou-se a investigar a possibilidade de aplicação do método dos elementos discretos ao estudo do processo de produção de areia em arenito friável. Os parâmetros micro-mecânicos são adotados e alguns dados do poço são assumidos conforme o trabalho de COELHO [12]. Para simular o efeito do fluido sobre o meio granular adotou-se um fluxo radial permanente através da parede do poço, tal como numa abordagem do problema de estabilidade de poços realizada no trabalho de POLILLO [53], onde se assumiu um raio de drenagem de 200 metros. Desta forma, o diferencial de pressão de fluido é dado pela equação (4.1).

$$\Delta p(r) = \frac{p_w - p_e}{\ln\left(\frac{r_e}{r_w}\right)} \ln\left(\frac{r_e}{r}\right) \quad (4.1)$$

onde  $p_w$  é a pressão de fluido na parede do poço,  $p_e$  é a pressão do reservatório,  $r_e$  é raio de drenagem,  $r$  é a distância a partir do eixo do poço. Na parede do poço o diferencial de pressão  $\Delta p$  é 15 MPa. Com este diferencial de pressão, calcularam-se as forças de pressão de fluido sobre as partículas através das equações (4.2) e (4.3), descritas no trabalho de HOOMANS *et al* [30], isto é,

$$F = \frac{V_p \beta}{(1 + \varepsilon)} (u - v_p) - V_p \nabla p \quad (4.2)$$

onde  $v_p$  é velocidade da partícula,  $u$  a velocidade local do fluido e  $V_p$  o volume da partícula. O segundo termo da equação é devido ao gradiente de pressão, e o primeiro é devido à força de arrasto, onde, para frações de vazios ( $\varepsilon < 0.8$ ),  $\beta$  é dado por,

$$\beta = 150 \frac{(1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon} \frac{\mu}{d_p^2} + 1.75(1 - \varepsilon) \frac{\rho}{d_p} |u - v_p| \quad (4.3)$$

onde  $d_p$  é o diâmetro da partícula,  $\mu$  é a viscosidade do fluido do reservatório e  $\rho$  a sua densidade. Para o cálculo da velocidade do fluido, aplicou-se a Lei de Darcy dada pela por,

$$u = -\frac{k}{\mu} \nabla p \quad (4.4)$$

onde  $k$  é a permeabilidade da formação rochosa. A força dada pela equação (4.2) é então adicionada na equação (2.32), que descreve o movimento da partícula.

Para a execução deste exemplo a análise é dividida em duas fases. Na primeira simula-se a fase de perfuração com a retirada dos elementos situados na região de perfuração, quando então ocorre um rearranjo no estado de tensões no poço. Na segunda fase, aplica-se a força de fluido simulando a operação de produção no poço.

O exemplo modelado possui dimensões de aproximadamente 1 metro de largura, 1 metro de altura e 8 centímetros de espessura conforme a Figura 4.9, composto de 37000 elementos com diâmetros variando entre 2 a 20 milímetros. O diâmetro do poço é de 0.18 metros. Foi considerado um estado tensões iniciais de confinamento de 18 MPa. Este nível de tensão é mantido nos contornos durante a simulação através do movimento das paredes. Os resultados são apresentados em termos do deslocamento e da velocidade das partículas, para as duas fases da simulação.

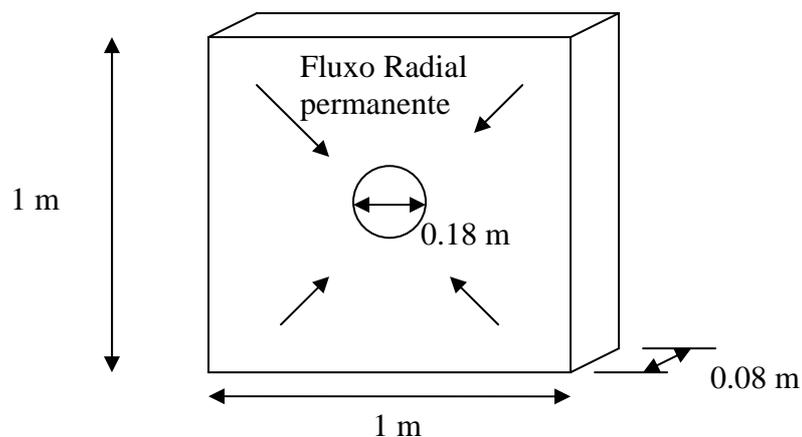


Figura 4.9 - Modelo de elemento discreto para simulação da produção de areia.

Os demais parâmetros de análise utilizados nesta aplicação estão nas tabelas Tabela 12.

Simulação - Produção de Areia	
Propriedades Físicas	Valor
Módulo elástico normal $k^n$ (N/m)	$1.3 \times 10^8$
Módulo elástico tangencial $k^t$ (N/m)	$1.3 \times 10^7$
Ângulo de atrito $\phi$ (graus)	$26^\circ$
Força de coesão (N)	635
Massa específica $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	$3 \times 10^3$
Coefficiente de restituição normal $\eta^n$	$1 \times 10^{-4}$
Coefficiente de restituição tangencial $\eta^t$	$1 \times 10^{-4}$
Força de tração máxima $F$ (N)	$1.3 \times 10^3$
Parâmetro $\varepsilon$ da curva de $f^n$	$1 \times 10^{-8}$
Permeabilidade da formação $k$ (m <sup>2</sup> )	$1.8 \times 10^{-10}$
Viscosidade do fluido reservatório $\mu$ (kg/ms)	$13.5 \times 10^2$
Densidade do fluido do reservatório $\rho$	0.85

Tabela 12 - Parâmetros micro-mecânicos para simulação de areia

A evolução do campo de deslocamentos e velocidades para fase de perfuração do poço são apresentados na Figura 4.10 e na Figura 4.11. Já a Figura 4.12 e a Figura 4.13 mostram os deslocamentos e velocidades na fase de produção.

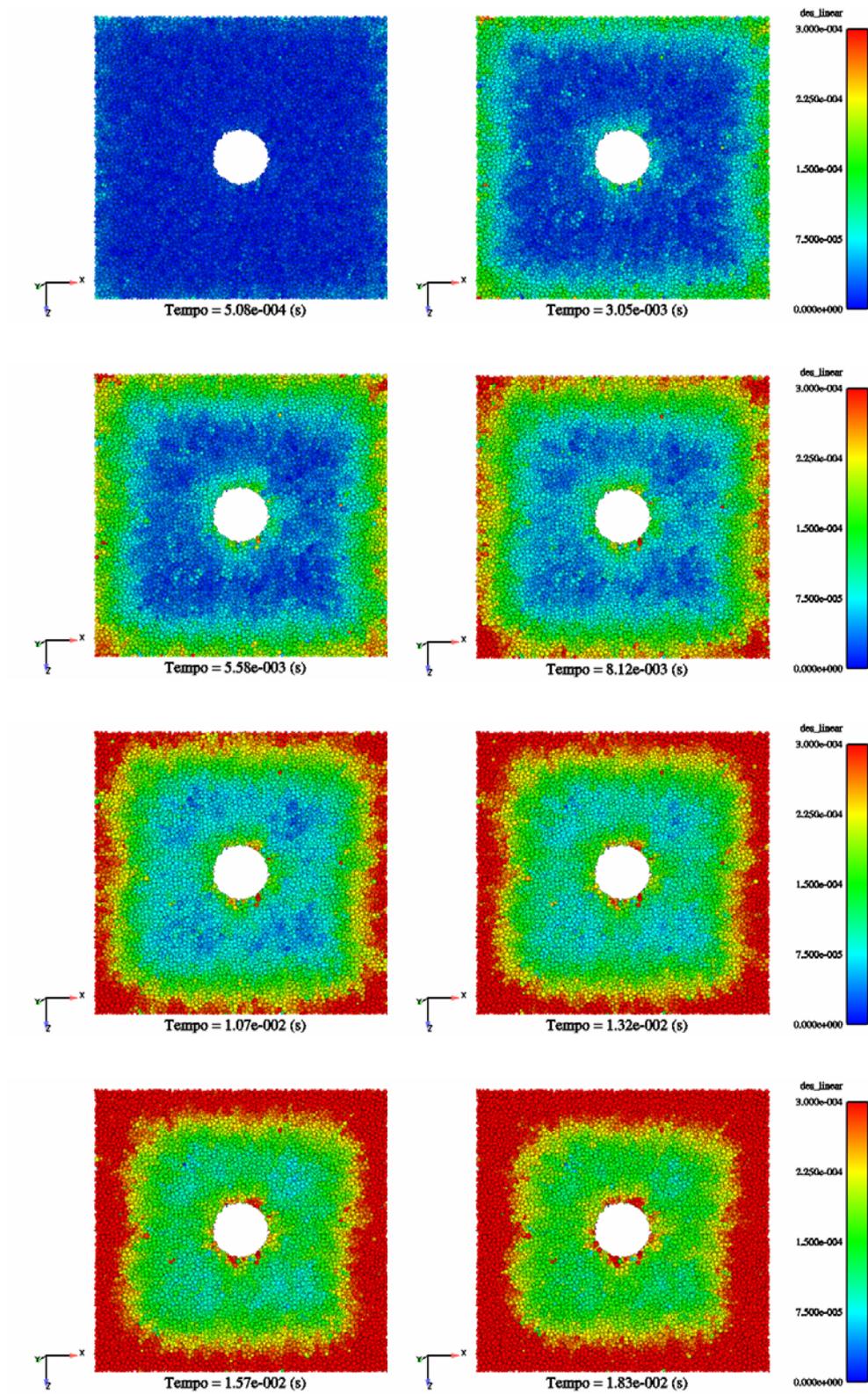


Figura 4.10 - Campo de deslocamento na fase de perfuração do poço.

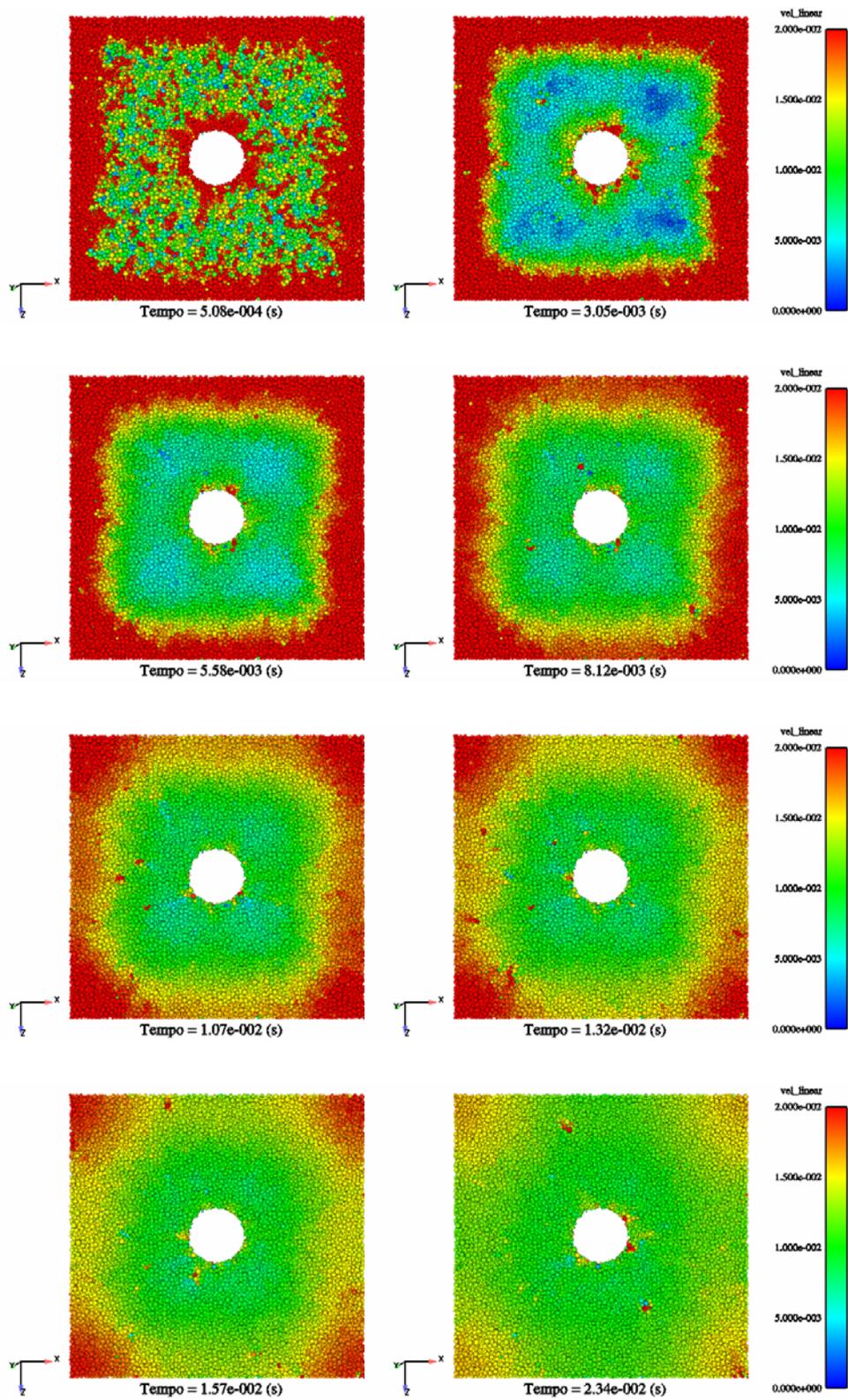


Figura 4.11 - Campo de velocidade na fase de perfuração do poço.

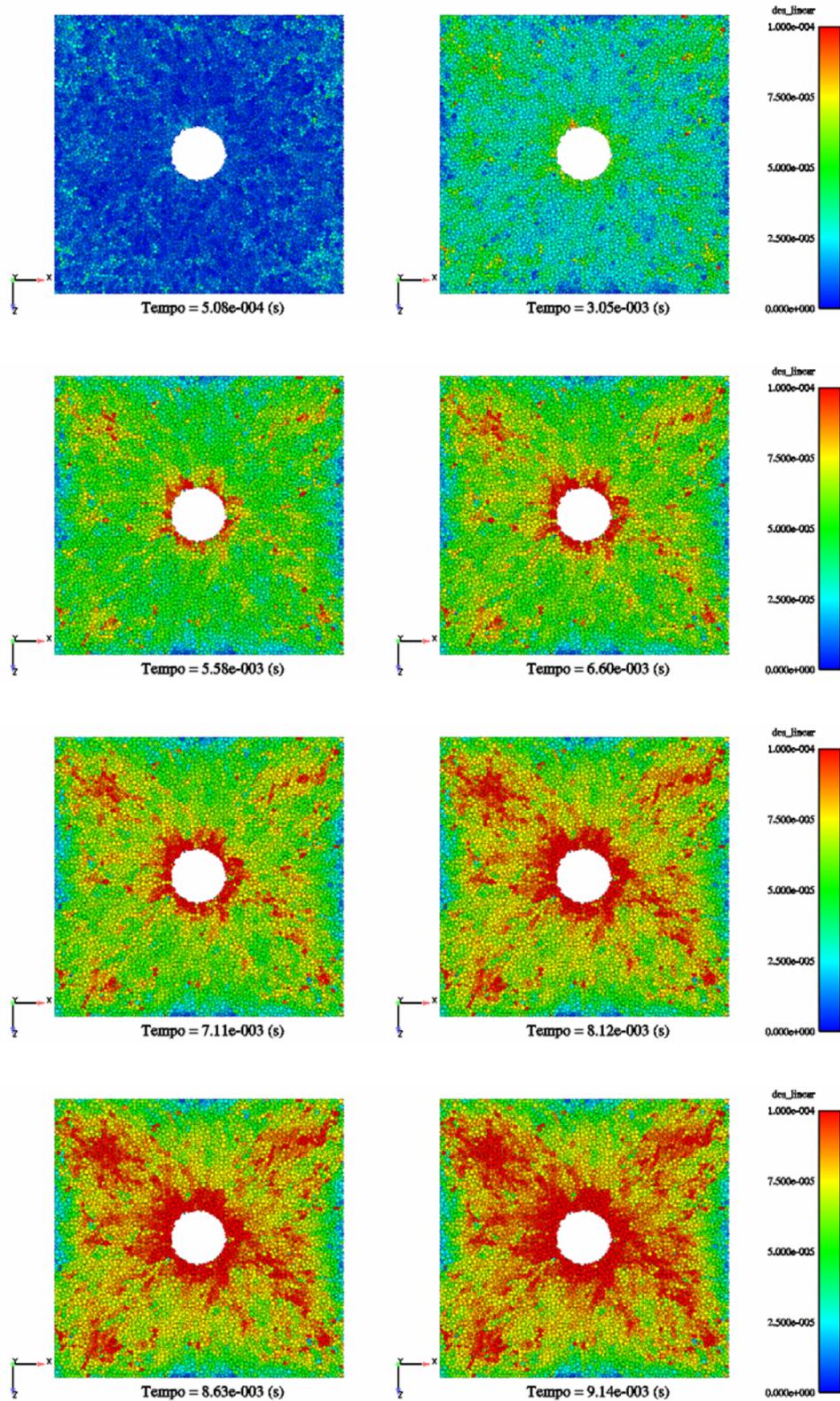


Figura 4.12 - Campo de deslocamento na fase de produção do poço.

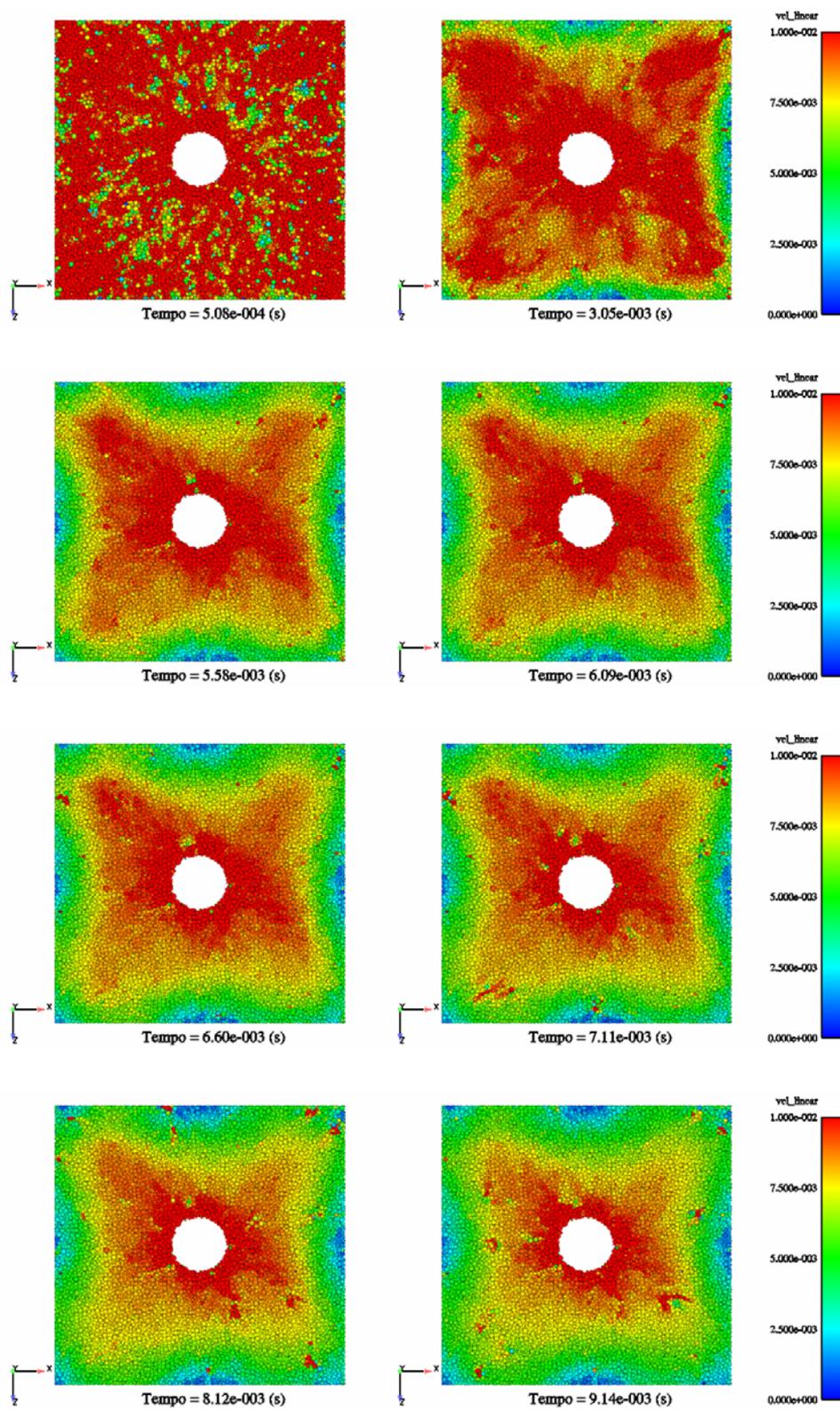


Figura 4.13 - Campo de velocidade na fase de produção do poço.

Com relação à análise dos resultados, tem-se, inicialmente, o entendimento de que os parâmetros utilizados podem ter uma sensível variação para que a simulação seja mais representativa. Além disso, esta foi uma das primeiras experiências nesta abordagem, e que nos coloca o desafio de decidir questões sobre a modelagem, que ainda não tem qualquer proposta consensual. Podemos citar por exemplo, questões como o tamanho do modelo, considerando uma determinada fronteira de influência. Outro exemplo importante seria a questão do tempo de simulação, visto que o fenômeno de produção de areia pode ser um processo lento e gradual. Neste caso teria que se procurar soluções em regime permanente para o problema, utilizando por exemplo uma técnica de relaxação dinâmica.

Algumas conclusões qualitativas são tiradas a partir dos resultados apresentados. Primeiramente, nota-se que, nos instantes iniciais de cada fase, há uma perturbação difusa no sistema, revelada pelas velocidades das partículas, com concentrações localizadas. Posteriormente, o movimento torna-se mais harmonioso, como uma certa frequência de flutuações localizadas, possivelmente decorrentes da quebra do contato entre partículas coesas, ou choque de partículas soltas. Este comportamento estaria simulando fraturas localizadas.

Um outro comportamento que pode ser observado na fase de perfuração é a formação de um arco de compactação em torno do poço, revelado pela variação do deslocamento ao longo do raio. Pode-se notar que o deslocamento é maior na parede do poço, diminuindo conforme se aproxima da zona compactada. Nas regiões mais distantes os deslocamentos voltam a aumentar. Aqui cabe a ressalva de que não se pode concluir que o aumento dos deslocamentos próximos às fronteiras tenha ou não alguma relação com esta região de influência que foi admitida.

Com relação ao desempenho computacional na Tabela 13 são apresentadas a plataforma computacional utilizada e o tempo de processamento da análise.

Análise executada em PC com processador Pentium 4 ( 2.40 GHz – 1 GB de RAM )			
Passo de tempo	Número de passos de tempo	Tempo de CPU	Tempo de simulação
$5.08 \times 10^{-8}$ s	670,000	123 h	$3.4 \times 10^{-2}$ s

Tabela 13 - Tempo de processamento

## 4.5 Simulação da Segregação Granular.

Neste exemplo, é realizada a simulação da segregação em meio granular, induzida por vibrações e diferença no tamanho das partículas. Este fenômeno, conhecido como ‘efeito castanha-do-pará’, tem sido muito pesquisado, pois os avanços no conhecimento deste problema encontram muitas aplicações, como por exemplo na indústria de fármacos, na indústria de alimentos, etc. A sua importância se deve, entre outras razões, à necessidade de se preservar a homogeneidade em misturas, num contexto onde esta propriedade afeta a qualidade da mistura.

O exemplo simulado trata-se de uma caixa contendo uma certa quantidade de partículas, que, por simplicidade, tem as mesmas características, com exceção de uma partícula que tem o diâmetro três vezes maior, que propositadamente é localizada próximo ao fundo da caixa. Durante a simulação, a caixa é submetida a uma oscilação harmônica na direção vertical, com frequência de vibração de 20 Hz, e amplitude de aceleração igual a três vezes a aceleração da gravidade. Estes valores, bem como a relação entre o diâmetro da partícula maior e o diâmetro das demais, foram adotados com base no trabalho de ROSATO *et al* [56], onde se realiza a análise de uma série de pesquisas experimentais e teóricas, com objetivo de investigar a influência de vários parâmetros envolvidos no problema, de tal sorte que se possa formular uma explicação física para este fenômeno.

As dimensões da caixa são em metros (0.1 x 0.1 x 0.12), os parâmetros físicos utilizados nesta aplicação são apresentados na Tabela 14, e os outros dados geométricos do modelo na Tabela 15.

O resultado da simulação é apresentado na Figura 4.14, em termos do deslocamento granular, onde se mostra uma vista a partir do plano médio, para evidenciar o efeito de segregação. Na Figura 4.15 apresenta-se uma vista lateral do modelo, em que o padrão de distribuição de deslocamento sugere a ocorrência de convecção granular, que é

descendente pelos cantos da caixa e ascendente pelo seu centro. A clareza deste evento pode ter sido influenciada pelas dimensões do modelo.

Segregação Granular	
Propriedades Físicas	Valor
Módulo elástico normal $k^n$ (N/m)	$5 \times 10^4$
Módulo elástico tangencial $k^t$ (N/m)	$5 \times 10^4$
Ângulo de atrito $\phi$ (graus)	$25^\circ$
Força de coesão (N)	0
Massa específica $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	$0.9 \times 10^4$
Coefficiente de restituição normal $\eta^n$	0.3
Coefficiente de restituição tangencial $\eta^t$	0.3
Força de tração máxima $F$ (N)	0
Parâmetro $\varepsilon$ da curva de $f^n$	0.999

Tabela 14 - Parâmetros micro-mecânicos para simulação da segregação granular

Simulação da Segregação Granular	
Propriedades Geométricas	
Diâmetro máximo (m)	0.024
Diâmetro mínimo (m)	0.008
Número de elementos	2000

Tabela 15 - Dados geométricos da simulação de segregação granular.

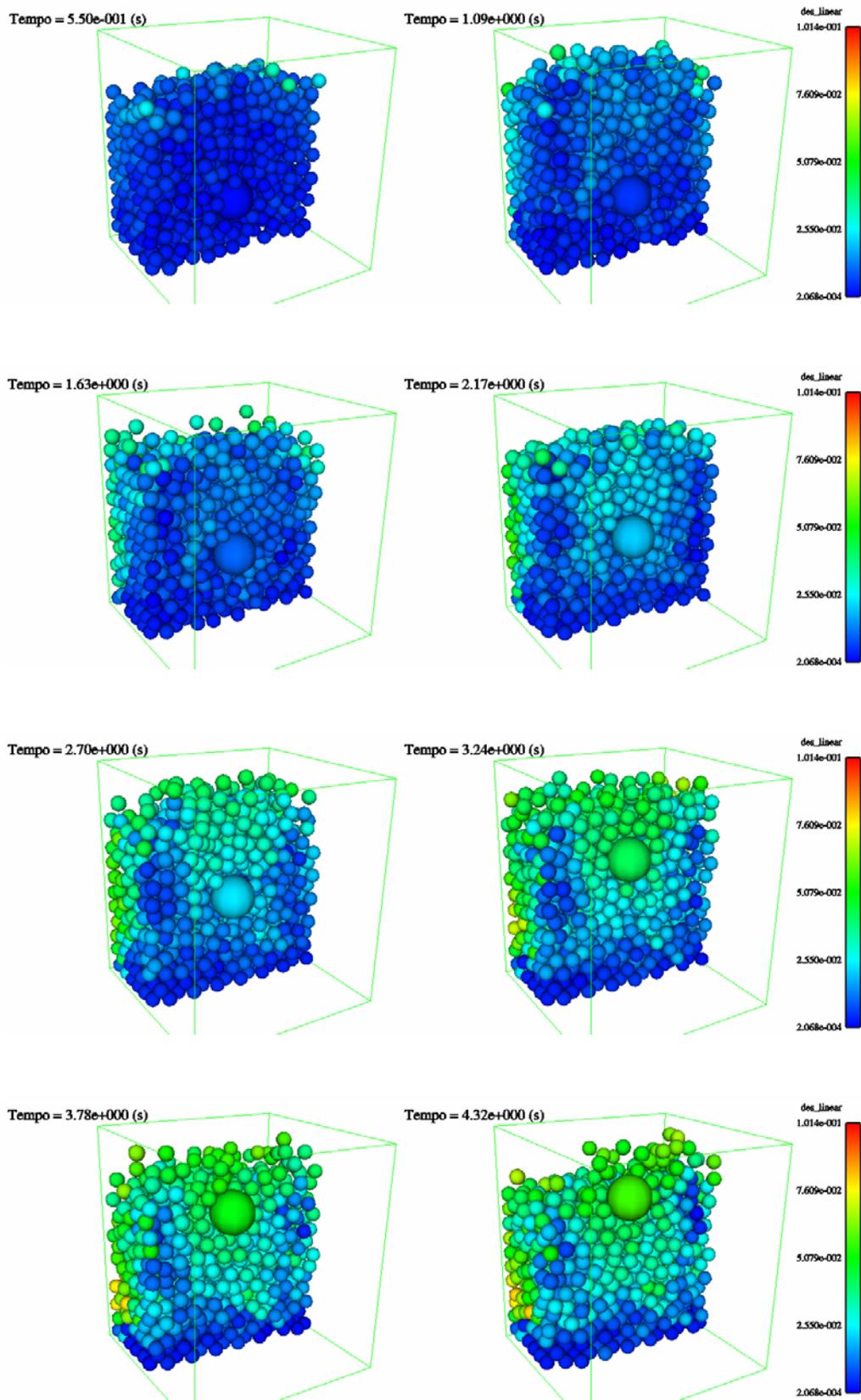


Figura 4.14 - Deslocamento granular em simulação da segregação.

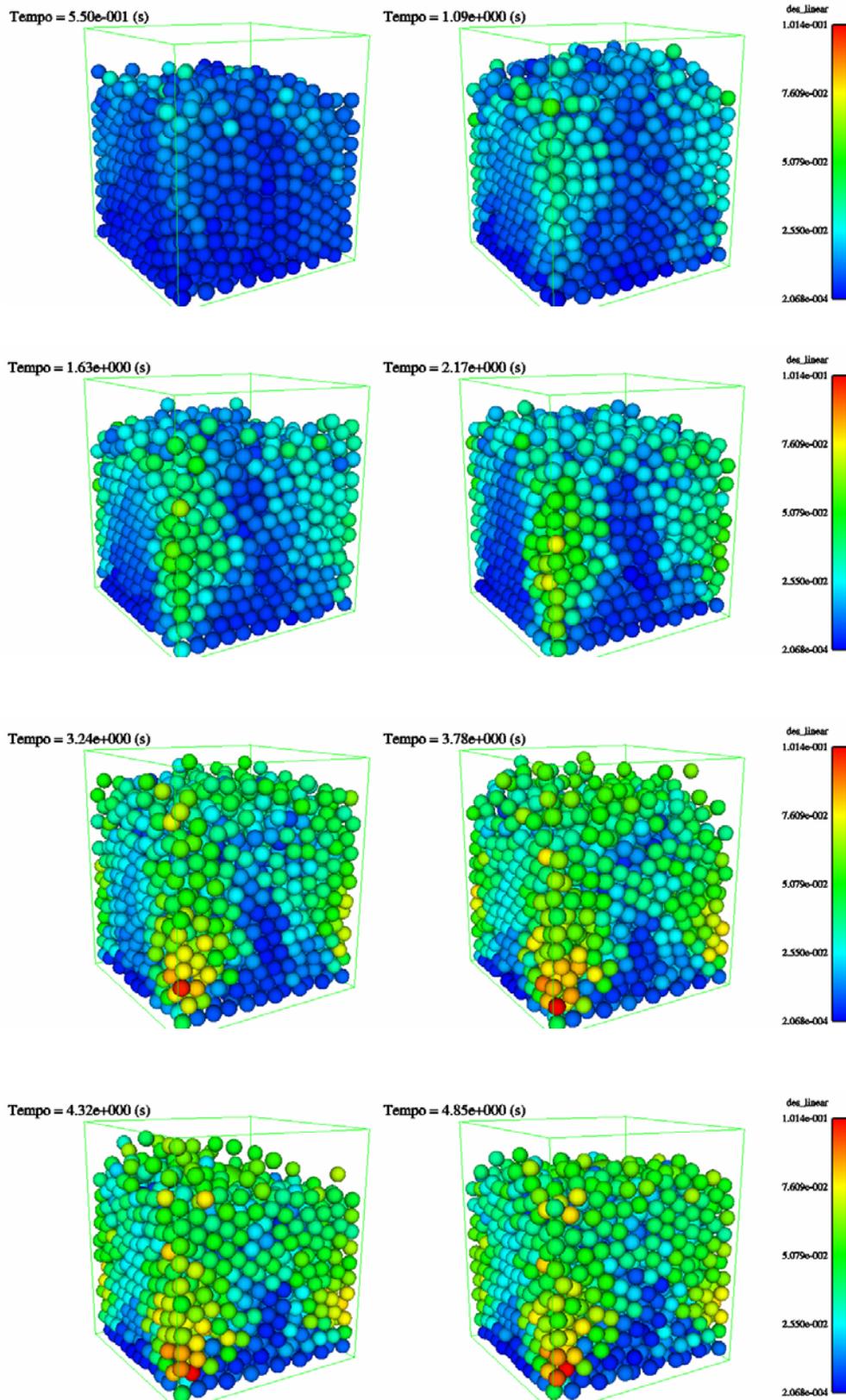


Figura 4.15 - Deslocamento granular no contorno do modelo.

Com relação ao desempenho computacional na Tabela 16 são apresentadas a plataforma computacional utilizada e o tempo de processamento da análise.

Análise executada em PC com processador Pentium 4 ( 2.40 GHz – 1 GB de RAM )			
Passo de tempo	Número de passos de tempo	Tempo de CPU	Tempo de simulação
$1.1 \times 10^{-5}$ s	427,000	36 h	4.69 s

Tabela 16 - Tempo de processamento

## 4.6 Oscilações Harmônicas em Meio Granular.

Neste exemplo, tenta-se reproduzir o comportamento de um meio granular submetido a vibrações harmônicas [4]. Um ensaio físico foi realizado pelo Grupo de Escoamentos Granulares do Instituto de Tecnologia da Califórnia (Caltech) [6], permitindo a observação do movimento granular através de imagens. Este mesmo grupo de pesquisadores realizou simulações numéricas, utilizando um modelo bidimensional do método dos elementos discretos, a fim de comparar com os resultados do ensaio experimental. Os resultados da análise experimental e da simulação numérica, disponibilizado pelos autores [6], estão ilustrados nas Figura 4.16 e Figura 4.17, respectivamente.

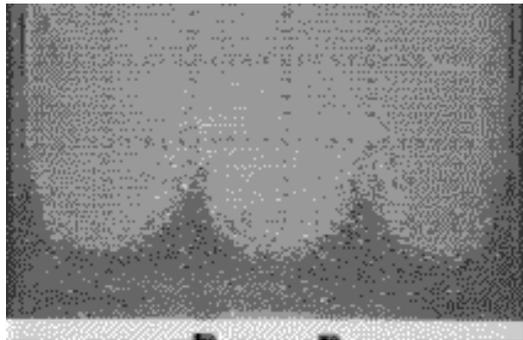


Figura 4.16 - Ensaio experimental de particulado sob oscilações harmônicas [6].



Figura 4.17 - Simulação de particulado sob oscilações harmônicas [6].

Seguindo a orientação do trabalho supracitado, optou-se pela tentativa de reproduzir a simulação numérica realizada por este grupo, pois os dados referentes à modelagem estão disponíveis na página destes pesquisadores. Além disso, a calibração de parâmetros já foi realizada e os resultados numéricos encontram-se disponíveis.

Para realizar a simulação 2D, utilizou-se a mesma formulação 3D, sendo que na dimensão da espessura adotou-se um valor igual ao diâmetro máximo das partículas do modelo. Assim, o modelo analisado corresponde a uma caixa com as dimensões em metros de (0.2 x 0.1 x 0.0011), contendo 3780 partículas, com uma distribuição uniforme de diâmetro variando de 0.9 a 1.1 mm. Foi aplicada na caixa uma oscilação harmônica na direção vertical, com frequência de vibração de 25 Hz, cuja amplitude de aceleração é igual a seis vezes a gravidade. Os demais parâmetros de análise estão na Tabela 17.

Oscilações harmônicas em meio granular	
Propriedades Físicas	Valor
Módulo elástico normal $k^n$ (N/m)	$5 \times 10^4$
Módulo elástico tangencial $k^t$ (N/m)	$5 \times 10^4$
Ângulo de atrito $\phi$ (graus)	0
Força de coesão (N)	0
Massa específica $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	$0.25 \times 10^4$
Coefficiente de restituição normal $\eta^n$	0.7
Coefficiente de restituição tangencial $\eta^t$	0.7
Força de tração máxima $F$ (N)	0
Parâmetro $\varepsilon$ da curva de $f^n$	0.999

Tabela 17 - Parâmetros micro-mecânicos.

Os resultados desta simulação são apresentados na Figura 4.18, onde as partículas estão coloridas de acordo com o diâmetro.

Com relação ao desempenho computacional na Tabela 18 são apresentadas a plataforma computacional utilizada e o tempo de processamento da análise.

Análise executada em PC com processador Pentium 4 ( 2.40 GHz – 1 GB de RAM )			
Passo de tempo	Número de passos de tempo	Tempo de CPU	Tempo de simulação
$6.18 \times 10^{-7}$ s	5,000,000	61 h	3.09 s

Tabela 18 - Tempo de processamento

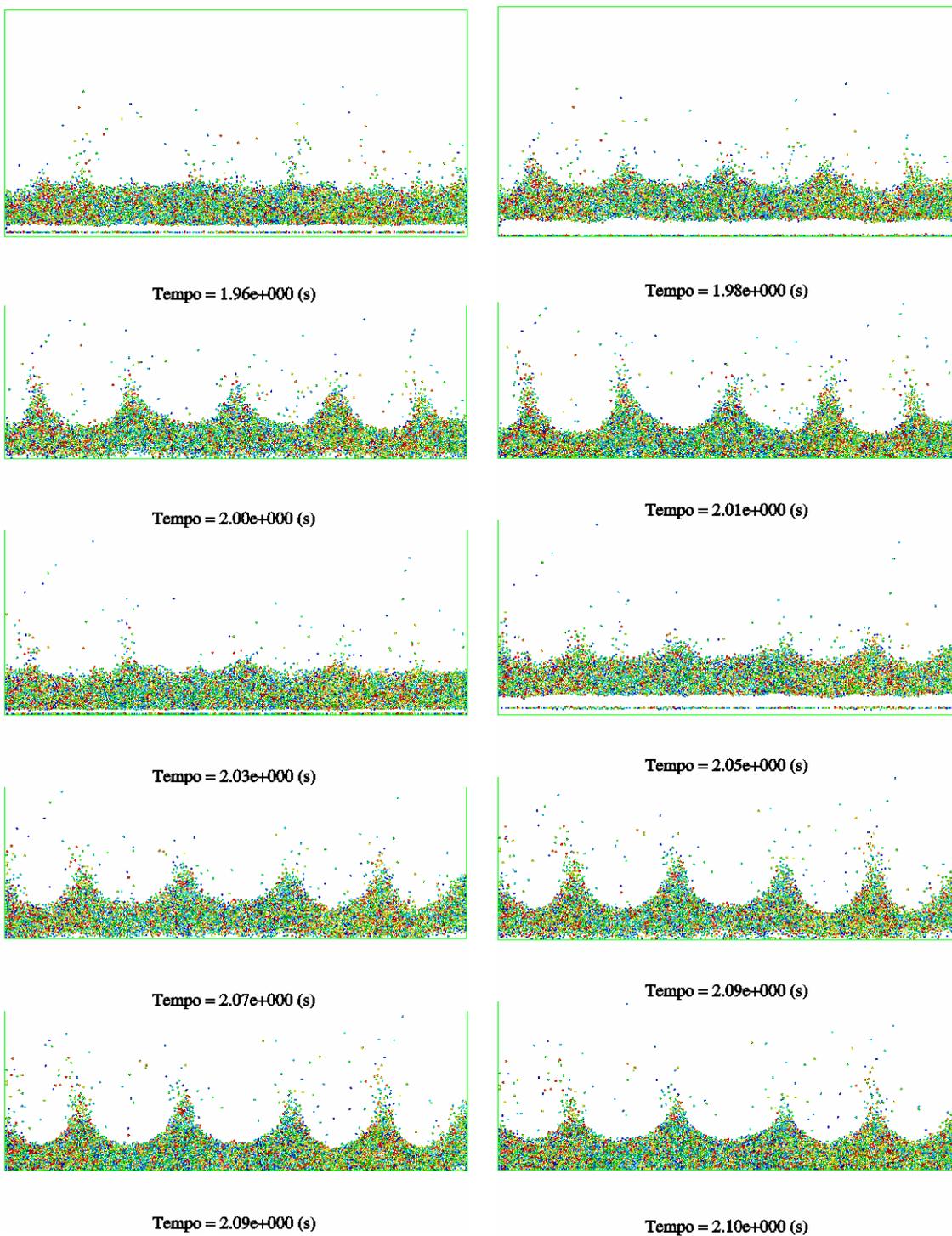


Figura 4.18 - Simulação de particulado submetido a oscilações harmônicas.

Observa-se grande semelhança na comparação com os resultados mencionados anteriormente.

# Capítulo 5

## Conclusões e Recomendações

### 5.1 Contribuições deste Trabalho

Os objetivos iniciais deste trabalho foram atingidos, e o êxito na implementação do programa é demonstrado através dos exemplos simulados. Nestes exemplos analisados com o programa observa-se o potencial de aplicação que essa ferramenta numérica representa para estudo dos meios descontínuos de um modo geral. Além disso, abrem-se novas perspectivas de análise, para o tratamento do problema de produção de areia, que é de grande importância para a indústria do petróleo.

A implementação do programa para geração de modelos de elementos discretos teve um papel importante no desenvolvimento, pois este tornou possível a obtenção dos vários modelos utilizados, e alguns destes com número razoavelmente grande de elementos.

O modelo não linear com adesão utilizado na relação constitutiva, foi também muito importante para este trabalho, uma vez que permitiu a avaliação de diversos comportamentos presentes nos meios granulares simplesmente variando-se os parâmetros da curva que define a variação da força de contato.

Do ponto de vista computacional, o programa implementado utilizando OpenMP [7] para as plataformas do Cray SV1 NACAD\COPPE\UFRJ e do CRAY T94 do CESUP/RS, apresentou um desempenho razoável. Com a utilização das diretivas OpenMP, o programa manteve-se portátil para computadores pessoais que têm evoluído rapidamente. Assim, tem sido possível realizar análises em modelos cada vez maiores nestes equipamentos.

## 5.2 Considerações Gerais

Observa-se no modelo de elementos discretos implementado que, mesmo considerando um elemento mais simples como a esfera, o método permite realizar análise com bastante detalhes no tratamento dos fenômenos em pequena escala. A partir do ajuste dos parâmetros de contato é possível simular uma grande variedade de materiais de natureza discreta. O modelo tem uma abordagem relativamente simples da mecânica, mas que possibilita reproduzir com aproximação razoável alguns problemas, com foco na identificação de mecanismos importantes, como os diversos modos de deformação e de fratura dos materiais.

O custo computacional para realização da busca dos pares de contato é ainda extremamente elevado. Este aspecto aponta para o desenvolvimento de técnicas que possam melhorar o desempenho desta parte do código, sobretudo, em ambientes de computação paralela. Mais detalhes a respeito das técnicas de busca são discutidos nos trabalhos de NEAL [49], WRIGGERS [66] entre outras fontes.

Há muito espaço no desenvolvimento dos algoritmos para análise através do Método dos Elementos Discretos, sobretudo se comparado com outros métodos já consagrados na mecânica computacional. As arquiteturas dos modernos computadores abrem caminho nesse sentido. De modo que, o desenvolvimento dos algoritmos de MED e outros métodos de partículas como *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH), tem direcionado um foco para próximas pesquisas, inclusive com o objetivo de se explorar potencialidades de associação com outros métodos, como Método dos Elementos Finitos, de forma a maximizar o desempenho conjunto.

### 5.3 Sugestões para Trabalhos Futuros

Nota-se um grande potencial de aplicação do MED para estudo dos meios descontínuos. Entretanto, para se tornar uma aplicação efetiva, é necessário um esforço de pesquisa no desenvolvimento de metodologias para determinação dos parâmetros físicos que este método requer. Assim, uma sugestão para trabalhos futuros seria desenvolver uma técnica que permitisse obter a calibração destes parâmetros com dados experimentais do material, como módulo de elasticidade, coesão, ângulo de atrito, etc, de forma mais eficiente.

Problemas que envolvem a interação do meio contínuo com meio discreto ou granular, revelam a necessidade de mesclar os métodos capazes de representar o comportamento destes meios. O estudo da combinação do MED com o MEF em problemas bidimensionais, apresentado no trabalho de OÑATE e ROJEK [51], representa uma boa iniciativa neste sentido. Seguindo nesta linha, uma sugestão para trabalhos futuros seria a extensão desta abordagem para problemas tridimensionais, através da combinação de elementos discretos com elementos finitos.

Existe também a possibilidade de se trabalhar com métodos acoplados, para tratamento da interação de fluido com o meio granular. Esta seria mais uma área de pesquisa que encontraria muitas aplicações, como por exemplo, no estudo da produção de areia que foi abordado no capítulo anterior.

Outro problema que pode ser abordado no futuro seria o estudo e desenvolvimento de métodos que permitam algum tipo de tratamento dos dados micro-mecânicos resultantes da análise com elementos discretos, como força de contato e velocidade, no sentido de relacioná-los com grandezas macro, como tensões, compactação e outras grandezas usuais na engenharia. Pesquisas vêm sendo realizadas com foco neste problema. Alguns destes trabalhos estudam relações para constituição de um tensor de tensões médias para materiais granulares [38] [24].

Com relação ao desempenho computacional, em trabalhos futuros podem ser explorados aspectos como estruturas de dados mais eficientes e técnicas de reorganização dos dados, visando a otimização com base na hierarquia de memória. Um dos passos chave é a busca dos pares de contato em estrutura de dados dinâmicas.

## Referências Bibliográficas

- [1] ABASS, H.H., NASR-EL-DIN, H.A., BATAWEE, M.H., "Sand Control: Sand Characterization, Failure Mechanisms, and Completion Methods", *Society of Petroleum Engineers (SPE)*, paper 77686, 2002.
- [2] ABREU, C.R.A, *Desenvolvimento de Técnicas de Simulação de Sistemas Granulares para Aplicação na Indústria do Petróleo*. Seminário de Qualificação ao Doutorado., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil., 2002.
- [3] ALLEN, M.P., TILDESLEY, D.J., *Computer simulation of liquids*, Oxford University Press, Oxford, pp. 149-152, 1987.
- [4] BRENNEN, C.E., GHOSH, S., WASSGREN, C.R., "Vertical oscillation of a bed of granular material", *Journal of Applied Mechanics*, v. 63, pp. 156-161, 1996.
- [5] BUDGE, K.G., PEERY, J.S., "RHALE: A MMALE Shock Physics Code Written in C++", *International Journal of Impact Engineering* v. 14, pp. 107-120, 1993.
- [6] CALTECH - GRANULAR FLOWS GRUP, Web site <http://www.its.caltech.edu>, 2004.
- [7] CHANDRA, R., DAGUM, L., KOHR, D., MAYDAN, D., MCDONALD, J., MENON, R., *Parallel Programming in OpenMP*, MORGAN KAUFMANN PUBLISHERS, San Francisco, CA, USA, 2001.
- [8] CHEN, X., TAN, C.P., HABERFIELD, C.M., "Wellbore Stability Analysis Guidelines for Practical Well Design", In: SPE Asia Pacific Oil and Gas Conference, *Society of Petroleum Engineers (SPE)*, Journal 6972, pp. 117-126, Adelaide, Australia, October, 1996.

- [9] CHRISTIANSEN, E.L., CREWS, J.L., WILLIAMSEN, J.E., ROBINSON, J.H., NOLEN, A.M., "Enhanced Meteoroid and Orbital Debris Shielding", *International Journal of Impact Engineering*, v. 17, pp. 217-228, 1995.
- [10] CHRISTIANSEN, E.L., KERR, J.H. "Projectile Shape Effects on Shielding Performance at 7 km/s and 11 km/s", *International Journal of Impact Engineering* v. 20, pp. 165-172, 1997.
- [11] CLEARY, P.W., SAWLEY, M.L., "DEM Modeling of Industrial Granular Flows: 3D Case Studies and The Effect of Particle Shape on Hopper Discharge", *Applied Mathematical Modelling*, vol. 26, pp. 89-111., 2002.
- [12] COELHO, L.C., *Modelos de Ruptura de Poços de Petróleo*, Tese D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2001.
- [13] CRISFIELD, M.A., *Non-linear Finite Element Analysis of Solids and Structures*, vol. 1, John Wiley & Sons Ltd, Chichester, England, 1991.
- [14] CUNDALL, P.A., "A computer model for simulating progressive large scale movements in blocky rock systems". In: *Proc. Symp. Int. Soc. Rock Mechanics*, Nancy, France, vol. 1, paper , No. II-8, 1971.
- [15] CUNDALL, P.A., STRACK, O.D.L., "A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies", *Géotechnique*, vol. 29, No. 1, pp. 47-65, 1979.
- [16] CUNDALL, P.A., *UDEC - A Generalized Distinct Element Program for Modeling Jointed Rock*. Peter Cundall Associates, In: Report PCAR-1-80, U.S. Army, European Research Office, London, Contract DAJA37-79-C-0548, 1980.
- [17] CUNDALL, P.A., STRACK, O.D.L., "Modeling of microscopic mechanisms in granular material", In: *Mechanics of Granular Materials New Models and Constitutive Relations* (Edited by J.T. Jenkins and M. Satake), pp. 137-149, Elsevier, Amsterdam, 1983.

- [18] CUNDALL, P.A., "Formulation of a Three-dimensional Distinct Element Model- Part I. A Scheme to Detect and Represent Contacts in a System Composed of Many Polyhedral Blocks", *Int. J. Rock Mech. Min. Sci. & Geomech. Abstr.*, vol. 25, No. 3, pp. 107-116, 1988.
- [19] FAHRENTHOLD, E.P., "A Lagrangian Model for Debris Cloud Dynamics Simulation", *International Journal of Impact Engineering* v. 14, pp. 229-240, 1993.
- [20] FAHRENTHOLD, E.P., "Oblique Hypervelocity Impact Simulation for Whipple Shield-Protected Structures", *International Journal of Impact Engineering* v. 17, pp. 291-302, 1995.
- [21] FAHRENTHOLD, E.P., HORBAN, B.A., "A Hybrid Particle-Finite Element Method for Hypervelocity Impact Simulation", *International Journal of Impact Engineering* v. 23, pp. 237-248, 1999.
- [22] FAKHIMI, A., CARVALHO, F., ISHIDA, T., LABUZ, J.F., "Simulation of Failure Around a Circular Opening in Rock", *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences* v. 39, pp. 507-515, 2002.
- [23] FORTIN, J., HJIAJ, M., SAXCÉ, G., "An Improved Discrete Element Method Based on a Variational Formulation of the Frictional Contact Law", *Computers and Geotechnics* v. 29, pp. 609-640, 2002.
- [24] FORTIN, J., MILLET, O., SAXCÉ, G., "Construction of averaged stress tensor for a granular medium", *European Journal of Mechanics A/Solids*, vol. 22, pp. 567-582., 2003.
- [25] GERE, J.M., WEAVER, W.JR., *Análisis de Estructuras Reticulares*, 3<sup>a</sup>. Impresion, C.E.C.S.A., México, 1972.
- [26] GINSBERG, J.H., *Advanced Engineering Dynamics*, 2nd ed., Cambridge University Press, USA, 1998.

- [27] GOYAL, S., PINSON E., SINDEN, F.W., "Simulation of dynamics of interacting rigid bodies including friction 1: General problem and contact model". *Engineering with Computers*, v. 10 pp. 162-174, 1994.
- [28] HAIMSON, B., LEE, H., "Borehole breakouts and compaction bands in two high-porosity sandstones", *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, In Press, October 2003.
- [29] HART, R., CUNDALL, P.A., LEMOS, J., "Formulation of a Three-dimensional Distinct Element Model-Part II. Mechanical Calculations for Motion and Interaction of a System Composed of Many Polyhedral Blocks", *Int. J. Rock Mech. Min. Sci. & Geomech. Abstr*, vol. 25, No. 3, pp. 117-125, 1988.
- [30] HOOMANS, B.P.B., KUIPERS, J.A.M., BRIELS, VAN SWAAIJ, W.P.M., "Granular dynamics simulation of segregation phenomena in bubbling gas-fluidized beds", *Powder Technology*, vol. 109, pp. 41-48, 2000.
- [31] HUANG, H., *Discrete Element Modeling of Tool-Rock Interaction*, Ph.D. dissertation, Department of Civil Engineering, University of Minnesota, USA, 1999.
- [32] ISHIBASHI, I., AGARWAL, T., ASHRAF, S.A., "Anisotropic behaviors of glass spheres by a discrete element model and laboratory experiment". In: *Proc. of the 1st U.S. Conference on Discrete Element Methods (DEM)*, Colorado School of Mines, Golden, CO, 1989.
- [33] JOHNSON, A.A., TEZDUYAR, T.E., "3D Simulation of fluid-particle interactions with the number of particles reaching 100", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 145, pp. 301-321, 1997.
- [34] JOHNSON, G.R., PETERSEN, E.H., STRYK, R.A., "Incorporation of an SPH Option into the EPIC Code for a Wide Range of High Velocity Impact Computations", *International Journal of Impact Engineering* v. 14, pp. 385-394, 1993.

- [35] JOHNSON, G.R., STRYK, R.A., "Conversion of 3D Distorted Elements into Meshless Particles During Dynamic Deformation", *International Journal of Impact Engineering* v. 28, pp. 947-966, 2003.
- [36] JOHNSON, G.R., STRYK, R.A., BEISSEL, S.R., HOLMQUIST, T.J., "An Algorithm to Automatically Convert Distorted Finite Elements into Meshless Particles During Dynamic Deformation", *International Journal of Impact Engineering* v. 27, pp. 997-1013, 2002.
- [37] LEMOS, J.V., HART, R.D., CUNDALL, P.A., "A generalized distinct element program for modeling jointed rock mass" (a keynote lecture). Proc. *Int. Symp. Fundamentals of Rock joints*, Bjorkliden, Sweden (Edited by O. Stephansson), pp. 335-343. Centek, Luleå, Sweden, 1985.
- [38] LIAO, C.L., CHANG, T.P., YOUNG, D.H., "Stress-strain relationship for granular materials based on the hypothesis of best fit", *Int. J. Solids Structures*, vol. 34, Nos. 31, 32, pp. 4087-4100, 1997.
- [39] LIN, C.J., WEI, W.C.J., IWAI, T., HONG, C.W., GREIL, P., "Discrete Element Method (DEM) Simulation and Processing of Mo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Granules in a Fluidizing Bed", Proc. Natl. Sci. Coun. ROC(A), vol. 24, No. 5, pp. 394-404, 2000.
- [40] LIU, S.H., SUN, D.A., WANG, Y., "Numerical Study of Soil Collapse Behavior by Discrete Element Modelling", *Computers and Geotechnics* v. 30, pp. 399-408, 2003.
- [41] LORIG, L.J., CUNDALL, P.A., "Modeling of reinforced concrete using the distinct element method", In: *Fracture of concrete and rock* (Edited by S. P. Shah and S. E. Swarty), pp. 459-471, SEM, Bethel, CT, 1987
- [42] KIKUCHI, N., ODEN, J.T., *Contact Problems in Elasticity: A Study of Variational Inequalities and Finite Element Methods*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1988.

- [43] KLOSEK, J.T., *The Integration of Dynamics with a Discrete-Element Modeling System: Algorithms, Implementations, and Applications*, M.Sc. dissertation, Department of Civil and Environmental Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA, 1996.
- [44] MALVERN, L.E., *Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1969.
- [45] MERIAN, J.L., *Dinâmica*. Rio de Janeiro, Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 1976.
- [46] MISHRA, B.K., "A review of computer simulation of tumbling mills by the discrete element method: Part I – contact mechanics", *International Journal of Miner. Process.*, v. 71, pp. 73-93, 2003.
- [47] MIYAZAKI, H., LIU, H. YAMAGUCHI, T., "Simulation of platelet adhesion using a discrete element method", *12th Conference of the European Society of Biomechanics Dublin*, Ireland, 2000.
- [48] NASATECH, Hypervelocity Impact Simulation, Web site [www.nasatech.com](http://www.nasatech.com), 2004.
- [49] NEAL, M.O., *Contact-Impact by the Pinball Algorithm with Penalty, Projection, and Augmented Lagrangian Methods*, Ph.D. Thesis, Northwestern University, Evanston, Illinois, USA, 1989.
- [50] "Numerical simulations of discrete particle systems", *Powder Technology*, vol. 109, 2000.
- [51] OÑATE, E., ROJEK, J., "Combination of discrete element and finite element methods for dynamic analysis of geomechanics problems", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 193, pp. 3087-3128, 2004.

- [52] PLESHA, M.E., AIFANTIS, E.C., "On the modeling of rocks with microstructure",  
In: *Rock Mechanics - Theory - Experiment - Practice* (Edited by C.C. Mathewson), pp. 27-35, Association of Engineering Geologists, New York, 1983.
- [53] POLILLO, F<sup>o</sup>.A., *Um Procedimento para Análise de Estabilidade e Fraturamento de Poços de Petróleo*, Tese M.Sc., UFOP, Ouro Preto, MG, Brasil, 1987.
- [54] QUARANTA, F., *Modelagem de Problemas de Contato-Impacto Empregando Formulações Penalizadas do Método dos Elementos Finitos*, Tese D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2002.
- [55] QUENTREC, B., BROT, C., "New Method for Searching for Neighbors in Molecular Dynamics Computations", *Journal of Computational Physics*, v. 13, pp. 430-432, 1975.
- [56] ROSATO, A.D., BLACKMORE, D.L., ZHANG, N., LAN, Y., "A perspective on vibration-induced size segregation of granular materials", *Chemical Engineering Science*, v. 57, pp. 265-275, 2002.
- [57] STELLINGWERF, R.F., WINGATE, C.A. "Impact Modeling With Smooth Particle Hydrodynamics", *International Journal of Impact Engineering*, v. 14, pp. 707-718, 1993.
- [58] SADD, M.H., ADHIKARI, G., CARDOSO, F, "DEM simulation of wave propagation in granular materials", *Powder Technology*, vol. 109, pp. 222-233., 2000.
- [59] SANDIA NATIONAL LABORATORIES, Discrete Element Modeling, Web site [www.sandia.gov](http://www.sandia.gov), 2001.

- [60] THORNTON, C., NING, Z., "A theoretical model for the stick/bounce behaviour of adhesive, elastic-plastic spheres", *Powder Technology*, vol. 99, pp. 154-162, 1998.
- [61] THORNTON, C., YIN, K.K., "Impact of elastic with and without adhesion", *Powder Technology*, vol. 65, pp. 153-166, 1991.
- [62] TISSER, A.D., *Um Modelo Constitutivo para Análise de Estabilidade de Poços de Petróleo*, Tese de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2004.
- [63] TSUJI, Y., KAWAGUCHI, T., TANAKA, T., "Discrete particle Simulation of two-dimensional fluidized bed", *Powder Technology*, vol. 77, pp. 79-87, 1993.
- [64] WALTON, O.R., *Particle dynamic modeling of geological materials*, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, Report UCRL-52915, 1980.
- [65] WILLIAMS, J.R., PENTLAND, A., "Super-quadratics and modal dynamics for discrete elements in interactive design", *Int. J. Comp. Aided Eng. Software Eng. Comp*, vol. 9, pp. 115-127, 1992.
- [66] WRIGGERS, P., *Computational Contact Mechanics*, John Wiley & Sons Ltd, Chichester, England, 2002.

# Livros Grátis

( <http://www.livrosgratis.com.br> )

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)  
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)  
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)  
[Baixar livros de Matemática](#)  
[Baixar livros de Medicina](#)  
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)  
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)  
[Baixar livros de Meteorologia](#)  
[Baixar Monografias e TCC](#)  
[Baixar livros Multidisciplinar](#)  
[Baixar livros de Música](#)  
[Baixar livros de Psicologia](#)  
[Baixar livros de Química](#)  
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)  
[Baixar livros de Serviço Social](#)  
[Baixar livros de Sociologia](#)  
[Baixar livros de Teologia](#)  
[Baixar livros de Trabalho](#)  
[Baixar livros de Turismo](#)